

# THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DE NANCY I

Pour l'obtention du titre de

DOCTEUR-INGÉNIEUR

par

TRẦN-HỮU - LỢI

---

SUJET :

**Recherche d'une loi décrivant l'absorption  
des Rayons X  
de grandes longueurs d'onde.**

---

Soutenue publiquement le 18 Juin 1975 devant la Commission d'Examen

---

Membres du Jury :

Président : M. J. PROTAS  
Examineurs : MM. M. GANTOIS  
M. GERL  
C. ZELLER



# THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DE NANCY I

Pour l'obtention du titre de

DOCTEUR-INGÉNIEUR

par

TRẦN-HỮU-LỢI

---

SUJET :

## Recherche d'une loi décrivant l'absorption des Rayons X de grandes longueurs d'onde.

---

Soutenue publiquement le 18 Juin 1975 devant la Commission d'Examen

Membres du jury :

Président : M. J. PROTAS

Examineurs : MM. M. GANTOIS

M. GERL

C. ZELLER



A ma Grand'mère

A mes Parents

A ma Famille

A mes Amis



## PREMIERE PARTIE

### CHAPITRE I

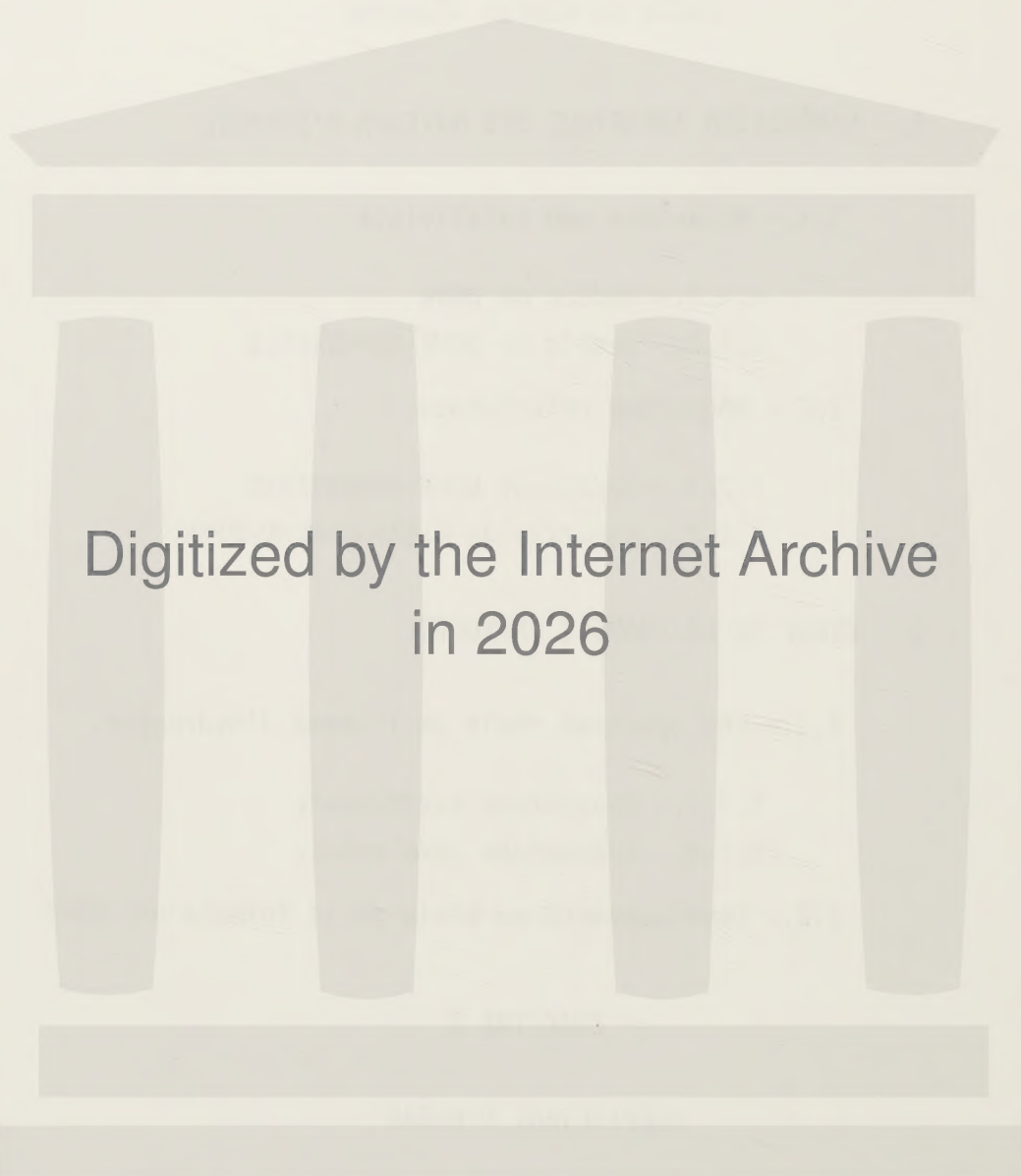
#### CHOIX DU MODELE ATOMIQUE

|                                                     |    |
|-----------------------------------------------------|----|
| 1 - EXPRESSION THEORIQUE DES NIVEAUX D'ENERGIE      | 1  |
| 1.1.- Mécanique non relativiste                     | 1  |
| 1.1.1.- <i>Modèle de BOHR</i>                       |    |
| 1.1.2.- <i>Modèle de BOHR-SOMMERFELD</i>            |    |
| 1.2.- Mécanique relativiste                         | 5  |
| 1.2.1.- <i>Modèle de BOHR-SOMMERFELD</i>            |    |
| 1.2.2.- <i>Equation de KLEIN-GORDON-DIRAC</i>       |    |
| 2 - ETUDE DE LA FORMULE APPROCHEE                   | 9  |
| 2.1.- Les spectres réels de l'atome d'hydrogène.    | 11 |
| 2.1.1.- <i>Correction relativiste</i>               |    |
| 2.1.2.- <i>Correction spin-orbite.</i>              |    |
| 2.2.- Développement en série de la formule de DIRAC | 14 |

### CHAPITRE 2

#### COEFFICIENT D'ECRAN

|                                         |    |
|-----------------------------------------|----|
| 1 - INTRODUCTION DU COEFFICIENT D'ECRAN | 16 |
| 2 - LES DOUBLETES                       | 18 |



Digitized by the Internet Archive  
in 2026

[https://archive.org/details/IA41555419\\_0019](https://archive.org/details/IA41555419_0019)

|                            |    |
|----------------------------|----|
| 2.1.- Doublets réguliers   | 18 |
| 2.2.- Doublets irréguliers | 19 |

### CHAPITRE 3

#### LA LOI DE REMPLISSAGE DES COUCHES ELECTRONIQUES ENERGIES DES NIVEAUX

|                                            |    |
|--------------------------------------------|----|
| 1 - COEFFICIENT PARTIEL D'ECRAN            | 21 |
| 2.1.- Principe de calcul                   | 22 |
| 2.2.- Discussion des résultats             | 25 |
| 2.3.- Remplissage des couches électronique | 26 |
| 2.4.- Calcul de l'énergie                  | 27 |



## DEUXIEME PARTIE

### CHAPITRE 1

#### INTERACTION DE PHOTO-MATIERE

|                                             |    |
|---------------------------------------------|----|
| 1 - AFFAIBLISSEMENT DU FAISCEAU DE RAYONS X | 29 |
| 2 - ASPECT THEORIQUE                        | 30 |
| 2.1.- Diffusion                             | 31 |
| 2.2.- Photo-absorption                      | 33 |
| 2.2.1.- Evaluation de la section efficace   |    |
| 2.2.2.- Effet AUGER                         |    |
| 2.2.3.- Difficultés théoriques.             |    |

### CHAPITRE 2

#### COEFFICIENTS D'ABSORPTION

|                                                                      |    |
|----------------------------------------------------------------------|----|
| 1 - RAPPELS                                                          | 40 |
| 2 - PROPOSITION POUR UNE DETERMINATION DES COEFFICIENTS D'ABSORPTION | 41 |
| 2.1.- Choix de la fonction                                           | 41 |
| 2.2.- Définition des régions limites                                 | 42 |

### CHAPITRE 3

#### VALIDITE DE LA FONCTION

|               |    |
|---------------|----|
| 1 - RESULTATS | 45 |
|---------------|----|



|                                            |    |
|--------------------------------------------|----|
| 2 - DISCUSSION                             | 46 |
| 2.1.- Constante C et exposant $n_0$        | 46 |
| 2.2.- Exposant $n^1(\mathbf{\Gamma}_1, Z)$ | 47 |
| 2.3.- Exposant $n^i(\mathbf{\Gamma}_i, Z)$ | 49 |
| 3 - CONCLUSION                             | 51 |



## INTRODUCTION

La microanalyse à la sonde électronique de CASTAING prend une place importante parmi les différentes méthodes d'étude par émission X, pour déterminer la composition d'échantillons massifs. Elle a d'abord été appliquée essentiellement aux éléments moyens-lourds (Fe, Co, Ni...).

On s'est rendu compte que son application aux éléments très légers tels que le bore , le carbone , l'azote , l'oxygène .. était beaucoup plus délicate puisqu'elle exigeait une connaissance précise des coefficients d'absorption de chaque élément.

Les calculs de nombreux auteurs (VICTORIENNE, HEINRICH, FRAZER,...) ont permis de les tabuler dans le domaine des rayons X durs. Cependant, les tables ne sont pas complètes dans celui des rayons X peu énergétiques.

Récemment, d'autres auteurs (HENKE, BEARDEN, KUKIRSKY,...) ont réussi à mesurer ces coefficients dans la gamme des grandes longueurs d'onde et en particulier pour les éléments légers.

En compilant les résultats récents nous nous proposons de trouver des lois conformes à la variation de ces coefficients d'absorption en fonction de la longueur d'onde incidente. Cette recherche se fera en deux étapes .



Il est indispensable de connaître les niveaux d'énergie qui définissent précisément les discontinuités d'absorption de l'élément. Nous étudierons donc, dans une première partie, les états énergétiques de l'atome. Plusieurs méthodes de calcul sont possibles. Celle que nous utiliserons est basée sur le principe de réciprocité de PAULI, elle nécessite l'introduction des coefficients d'écran.

Dans une seconde partie, nous aborderons la détermination du coefficient d'absorption. Les calculs théoriques, souvent délicats à mettre en oeuvre, n'ont pas fourni à ce jour de résultats définitifs. Nous proposerons une formule semi-empirique du type HEITLER et FERMI. Nous l'étendrons dans les autres intervalles de discontinuités d'absorption pour des éléments lourds.



## CHAPITRE 1

### CHOIX DU MODELE ATOMIQUE

#### 1 - EXPRESSION THEORIQUE DES NIVEAUX D'ENERGIE

Nous étudions un système très simple constitué d'un noyau de charge positive  $+Ze$  et d'un électron de charge  $-e$ . Un tel système est représenté par les ions hydrogénoïdes ou alcalinoïdes.

L'électron est soumis à une force centrale  $-\frac{Ze^2}{r^2}$  et son énergie sera calculée selon différents modèles.

Le problème est classique mais pourrait être généralisé à un système multiélectronique : atome . Deux cas se présentent selon la vitesse  $v$  de l'électron par rapport à celle de la lumière. Ceci revient à comparer  $\beta$  ( $=v/c$ ) à l'unité :

- en mécanique non relativiste :  $\beta \ll 1$
- en mécanique relativiste :  $\beta \neq 1$

##### 1.1.- Mécanique non relativiste ( $\beta \ll 1$ )

En coordonnées polaires, écrivons l'énergie cinétique  $T$  et l'énergie potentielle  $V$  :

$$T = \frac{m_0}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2)$$

$$V = - \frac{Ze^2}{r}$$



La fonction de LAGRANGE  $L = T - V$  est :

$$L(\dot{r}, r, \phi) = \frac{m_0}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + \frac{Ze^2}{r}$$

Les équations du mouvement de l'électron s'écrivent :

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dt}(p_\phi) - \frac{\partial L}{\partial \phi} &= 0 \\ \frac{d}{dt}(p_r) - \frac{\partial L}{\partial r} &= 0 \end{aligned} \right\} \longrightarrow \begin{cases} p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m_0 r^2 \dot{\phi} & (1) \\ p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m_0 \dot{r} & (2) \end{cases}$$

Puisque le Lagrangien  $L(\dot{r}, r, \phi)$  ne dépend ni de  $\phi$ , ni du temps explicitement, les deux lois de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie sont vérifiées.

Cependant, l'expression de l'énergie dépendra du modèle atomique envisagé.

#### 1.1.1.- Modèle de BOHR ( $r = \text{constante}$ ).

BOHR pose deux hypothèses :

- 1) L'électron a une orbite circulaire et son état est stationnaire :

$$\oint p_i dq_i = nh \quad (3)$$

- 2) Le passage de l'électron d'un état d'énergie  $E'_n$  à un autre  $E'_{n'}$  ( $E'_{n'} < E'_n$ ) s'exprime par la relation :

$$\nu_{nn'} = \frac{E_n - E'_{n'}}{h} \quad (4)$$

$h$  est la constante de Plank.



La première hypothèse donne  $\dot{r} = 0$ , ce qui entraîne :

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m_0 \dot{r} = 0$$

d'où

$$\frac{\partial L}{\partial r} = m_0 r \dot{\phi}^2 - \frac{Ze^2}{r^2} = 0 \rightarrow \dot{\phi}^2 = \frac{Ze^2}{m_0 r^3} \quad (5)$$

Son énergie mécanique est de la forme :

$$E = \frac{m_0}{2} r^2 \dot{\phi}^2 - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r} = \frac{1}{2} V \quad (6)$$

Le système possède un degré de liberté ( $q_i = \phi$ ). Les relations (1) et (3) conduisent aux équations :

$$\int p_\phi d\phi = p_\phi \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi p_\phi = nh$$

$$\text{et} \quad p_\phi = m_0 r^2 \dot{\phi} = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar \rightarrow \dot{\phi} = \frac{n\hbar}{m_0 r^2} \quad (7)$$

en comparant les deux relations (5) et (7), nous obtenons :

$$r = \frac{(n\hbar)^2}{m_0 Ze^2}$$

$$\dot{\phi} = \frac{m_0 Z^2 e^4}{(nh)^3}$$

D'après l'équation (6), l'énergie de l'électron devient :

$$E_n = \frac{-2\pi^2 m_0 Z^2 e^2}{(nh)^2} = \frac{-m_0 e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{Z}{n}\right)^2 \quad (8)$$

Elle définit les états d'énergie stables de l'atome et la relation (4) caractérise ses spectres discrets. La vitesse, le rayon d'orbite et l'énergie de l'électron peuvent s'écrire sous forme simplifiée:

$$\beta = \frac{v}{c} = \frac{Z\alpha}{n} ; \quad r = \frac{n^2}{Z\alpha} \frac{\hbar}{m_0 c}$$



et 
$$E_n = -\frac{1}{2} m_0 c^2 \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2 ; \text{ avec } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad (9)$$

### 1.1.2.- Modèle de BOHR-SOMMERFELD

SOMMERFELD reprend les hypothèses de BOHR. Il suppose cependant que l'orbite de l'électron est une ellipse. Le système possède maintenant 2 degrés de liberté qui correspondent à deux nombres quantiques  $n_r$  et  $n_\phi$  tels que :

$$\oint p_\phi d\phi = n_\phi h ; n_\phi : \text{nombre quantique azimuthal}$$

$$\oint p_r dr = n_r h ; n_r : \text{nombre quantique radial}$$

Le calcul de l'énergie utilise les relations :

$$p_r = m_0 \dot{r} \neq 0$$

$$p_\phi = m_0 r^2 \dot{\phi} = \text{constante}$$

L'énergie devient :

$$E = T+V = \frac{m_0}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) - \frac{Ze^2}{r} = \frac{m_0 \dot{r}^2}{2} + \frac{1}{2} \frac{p_\phi^2}{r^2} - \frac{Ze^2}{r}$$

d'où

$$\dot{r} = \left( 2 m_0 E + \frac{2m_0 Ze^2}{r} - \frac{p_\phi^2}{r^2} \right)^{1/2}$$

Ce qui donne [1]

$$\oint p_\phi d\phi = \int_0^{2\pi} p_\phi d\phi = 2\pi p_\phi = n_\phi h$$

$$\oint p_r dr = 2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} p_r dr = 2\pi (-p_\phi + Ze^2 \sqrt{\frac{m_0^2}{-2E}}) = n_r h$$



Les deux relations conduisent finalement à l'énergie de l'électron qui dépend de deux nombres quantiques  $n_\phi$  et  $n_r$  :

$$E_{n_\phi, n_r} = - \frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^2} \left( \frac{Z}{n_r + n_\phi} \right)^2$$

en posant  $n = n_r + n_\phi$  ; cette énergie a la même expression que celle de BOHR dans laquelle  $n_\phi = 1, 2, \dots$ ;  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  pour  $n$  fixé, l'électron peut donc avoir plusieurs orbites  $n_\phi$  différentes, de même  $E_n$ . L'excentricité de l'ellipse  $\epsilon$  ( $\epsilon = \sqrt{1 - \frac{n_\phi^2}{n^2}}$ ) définit la trajectoire de l'électron :

- Lorsque  $n_\phi = 0$ , l'électron décrit une trajectoire rectiligne passant par le noyau ; nous excluons cette valeur.
- Plus  $n_\phi$  décroît, plus l'ellipse devient allongée et passe près du noyau.

Ce modèle introduit les notions d'orbites pénétrantes et non pénétrantes. Nous verrons plus tard les analogies avec le modèle d'orbitale.

La vitesse de l'électron, proportionnelle à  $\frac{Z}{n}$ , devient importante pour  $n$  faible et  $Z$  grand ; l'effet relativiste n'est plus négligeable.

## 1.2.- Mécanique relativiste ( $\beta \neq 1$ )

### 1.2.1.- Modèle de BOHR-SOMMERFELD

Cette fois, la variation de la masse de l'électron, en fonction de la vitesse doit être considérée :

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

$m_0$  est sa masse au repos.



La fonction de LAGRANGE a maintenant l'expression :

$$L = - m_0 c^2 \sqrt{1 - \beta^2} + \frac{Ze^2}{r}$$

avec 
$$\beta = \sqrt{\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2} / c$$

L'analyse détaillée [3] montre que l'électron a une trajectoire en rosette. La période du rayon vecteur est plus longue que celle de la variable  $\phi$ . Le mouvement devient alors quasi-périodique.

L'expression de l'hamiltonien est :

$$H = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2} - \frac{Ze^2}{r}$$

En posant  $E = H - m_0 c^2$ , somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle, SOMMERFELD obtient la formule :

$$E_{n_r, n_\phi} = m_0 c^2 \left[ 1 + \frac{(\alpha Z)^2}{(n_r + \sqrt{n_\phi^2 - (\alpha Z)^2})^2} \right]^{-1/2} - m_0 c^2 \quad (10)$$

interprétée ultérieurement selon son développement en série.

En résumé, le modèle semi-quantique permet de calculer la fréquence de radiation (4) mais pas son intensité. D'ailleurs, la dégénérescence des multiplets de même  $n$  n'est prévue qu'au moyen du modèle quantique : traitant le même problème, KLEIN-GORDON puis DIRAC obtiennent une relation analogue à celle de BOHR-SOMMERFELD (10).

### 1.2.2.- Equation de KLEIN-GORDON (sans spin).

En mécanique relativiste, le quadrivecteur énergie-impulsion  $(p, E)$  d'une particule libre est invariant :

$$E^2 - c^2 p^2 - m_0^2 c^4 = 0$$



L'équation de KLEIN-GORDON s'obtient en substituant E et p par les opérateurs correspondants.

Ainsi, dans le cas de l'interaction avec la matière d'une onde électromagnétique (définie par le potentiel vecteur  $\vec{A}$  et scalaire  $\phi$ ) associée aux photons, cette équation [1] peut se mettre sous la forme :

$$\left\{ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right)^2 - c^2 \left( i\hbar \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - m_0^2 c^4 \right\} \psi = 0$$

Deux cas se présentent :

- En absence de photons ( $\vec{A} = 0$ ,  $V = e\phi = -\frac{Ze^2}{r}$ ), l'étude se réduit à celle du phénomène spectral de l'atome d'hydrogène :

$$\nabla^2 \psi + \frac{1}{ch^2} \left\{ (E - V)^2 - m_0^2 c^4 \right\} \psi(r) = 0$$

- En présence de photons, nous étudions le phénomène d'interaction photon-atome (voir la 2ème partie). La différence entre ces deux équations conduit à l'hamiltonien de la perturbation :

$$H = + \frac{e}{m_0} \vec{p} \cdot \vec{A} \quad (11)$$

Dans le cas où  $\vec{A} = 0$ ,  $\psi(r)$  a la forme :

$$\psi(r) = \frac{1}{r} R_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

dans laquelle la partie radiale  $R_l(r)$  vérifie l'équation suivante :

$$\left\{ \nabla_r^2 - A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\alpha^2 Z^2}{r^2} \right\} R_l(r) = 0 \quad (12)$$

$\alpha = \frac{e^2}{ch}$  est appelé constante de structure fine et le terme  $\left(\frac{Z\alpha}{r}\right)$  peut être considéré comme le potentiel d'interaction relativiste. L'étude de KLEIN-GORDON fournit l'expression de l'énergie :



$$E_{n,l} = m_0 c^2 \left[ 1 + \frac{(\alpha Z)^2}{\left( (k + \frac{1}{2}) + \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - (\alpha Z)^2} \right)^2} \right]^{-1/2} - m_0 c^2 \quad (13)$$

où  $n = k + l + 1$

DIRAC introduit le spin de l'électron, donc le couplage spin-orbite, qui fait intervenir un autre nombre quantique  $j'$  [6]. L'énergie devient :

$$E_{n,j,j'} = m_0 c^2 \left[ 1 + \frac{(\alpha Z)^2}{\left( (n - j - \frac{1}{2}) + \sqrt{j'^2 - (\alpha Z)^2} \right)^2} \right]^{-1/2} - m_0 c^2$$

et  $j'$  vaut  $j + \frac{1}{2}$

$$E_{n,l,j} = m_0 c^2 \left[ 1 + \frac{(\alpha Z)^2}{\left( (n - j - \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - (\alpha Z)^2} \right)^2} \right]^{-1/2} - m_0 c^2 \quad (14)$$

où  $n = 1, 2, 3, \dots$  représente respectivement les couches K, L, M, (niveaux principaux) tandis que les nombres quantiques azimutaux  $l = 0, 1, 2, 3, \dots (n-1)$  déterminent les états quantiques s, p, d, ... ou les trajectoires elliptiques de l'électron, et  $j$  ne prend que deux valeurs  $(l + 1/2)$  et  $(l - 1/2)$ .

Les nombres quantiques  $n, l, j$  définissent donc parfaitement l'état quantique de l'électron.

La formule (14) peut être obtenue à partir de celle de SOMMERFELD (10) à condition de remplacer  $n_\phi$  par  $(j + \frac{1}{2})$ . (d'après GORDON).

L'évolution de ces modèles a pour but de représenter au mieux les spectres expérimentaux :



Celui de BOHR n'explique que les spectres de l'atome d'hydrogène ou de l'ion  $\text{He}^+$ . Il provient du fait que le potentiel d'interaction est proportionnel à  $\frac{1}{r}$ . Cependant, pour les alcalins, les spectres sont beaucoup plus compliqués. Nous devons utiliser alors le modèle de BOHR-SOMMERFELD. L'intervention des deux nombres quantiques  $n_r$ ,  $n_\phi$  explique la dégénérescence des niveaux d'énergie.

Enfin, le modèle quantique introduit le nombre quantique interne  $j = l \pm 1/2$  levant la dégénérescence des multiplets de même  $l$ , sauf  $l = 0$ . Ainsi, pour les couches L ( $n = 2$ ), M ( $n = 3$ ), N ( $n = 4$ ), etc..., nous observons respectivement 3, 5, 7 niveaux etc.... Cette subdivision des niveaux constitue la structure fine de l'atome et est caractérisée par la constante  $\alpha$ .

Le diagramme ci-joint représente les niveaux d'énergie  $E_{n,l,j}$  et le spectre d'émission d'un atome :

- Le spectre des raies est gouverné par les règles de sélection :

$$\Delta l = \pm 1 ; \Delta j = 0, \pm 1$$

Il est facile de prévoir toutes les fréquences (4) susceptibles d'apparaître dans des transitions entre les différents niveaux. Les séries des raies spectrales K, L, M etc.. sont notées dans l'ordre décroissant des intensités des raies :

$$K_{\alpha 1}, K_{\alpha 2}, \dots ; K_{\beta 1}, K_{\beta 2}, \dots ; L_{\alpha 1}, L_{\alpha 2}, \dots$$

- Et le spectre continu d'absorption possède des discontinuités dont chacune est attribuée, sans ambiguïté, à l'excitation d'un électron d'une couche ( $n, l, j$ ).

## 2.- ETUDE DE LA FORMULE APPROCHEE

Nous cherchons, dans ce paragraphe, le développement en série de l'expression (14). Les interprétations sont basées sur le modèle



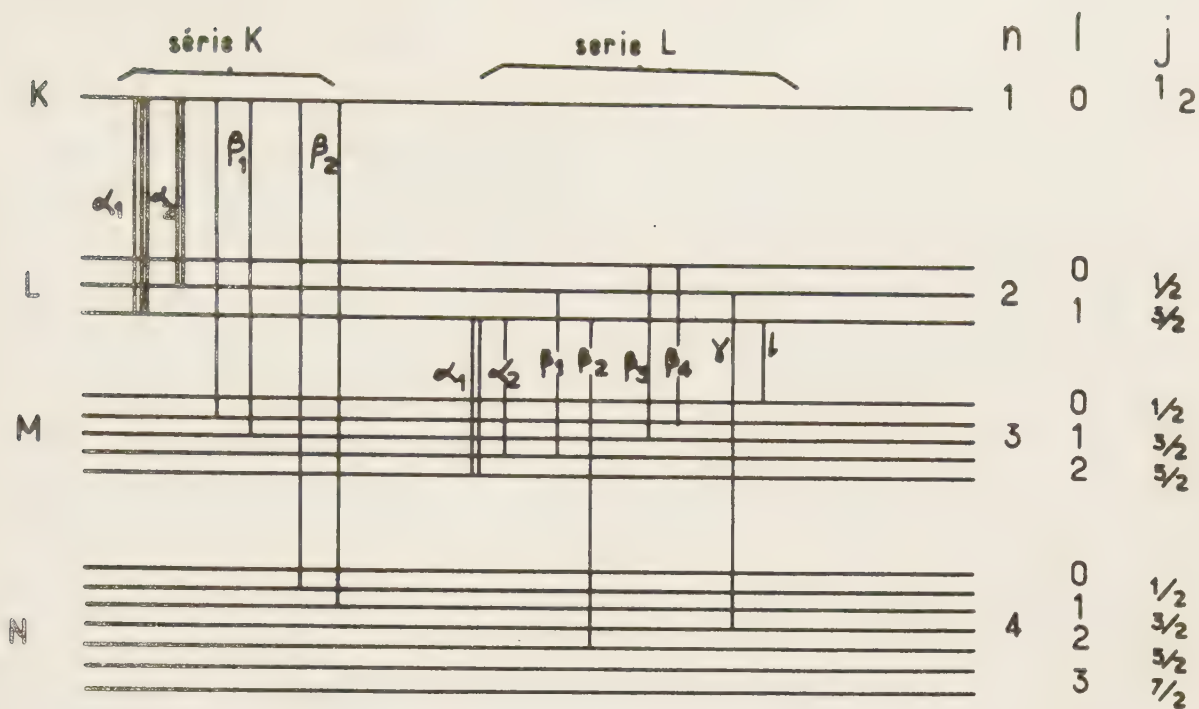
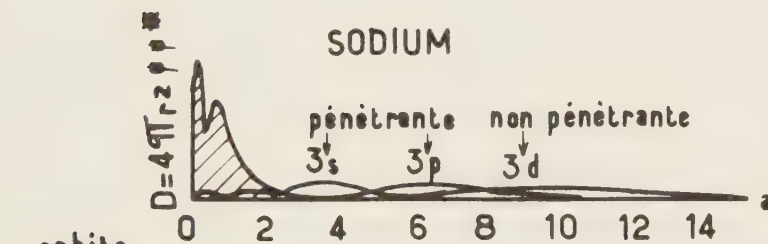
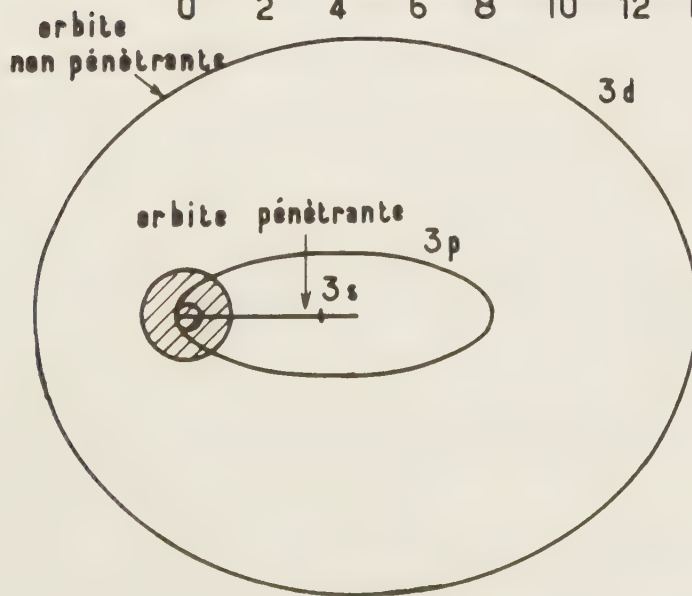


DIAGRAMME DES NIVEAUX D'ENERGIE



Modèle  
quantique



Modèle  
d'orbite

SCHEMAS COMPARATIFS



d'orbite : en effet, l'expression de l'énergie peut être calculée d'une façon simple permettant d'interpréter la structure fine de l'atome d'hydrogène. Si nous considérons la formule de BOHR (8) comme la formule approchée d'ordre zéro, les termes d'ordre supérieur seront calculés suivant les deux effets suggérés par DIRAC :

- effet relativiste
- effet de spin.

## 2.1.- Les spectres de structure fine de l'atome d'hydrogène.

Dans ce cas, l'énergie de l'électron est :

$$E_{n,l,j} = E_n + \langle \Delta E^r \rangle + \langle \Delta E^s \rangle \quad (15)$$

où  $\langle \Delta E^r \rangle$  est la correction relativiste, et  $\langle \Delta E^s \rangle$  est la correction spin orbite. Evaluons les.

### 2.1.1.- Correction relativiste.

L'énergie cinétique relativiste est :

$$E^r = c^2 (m - m_0) = m_0 c^2 \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right) \approx m_0 c^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \beta^2 - \frac{1}{8} \beta^4 - 1 \right)$$

$$E^r = m_0 c^2 \left( 1 + \frac{p^2 c^2}{2 m_0^2 c^4} \right)^{1/2} - m_0 c^2 \approx \frac{p^2}{2 m_0} - \frac{p^4}{8 m_0^3 c^4}$$

$\frac{p^2}{2 m_0}$  représente l'énergie cinétique classique ; la correction relativiste est :

$$\Delta E^r = \frac{-p^4}{8 m_0^3 c^4}$$



Par définition, la valeur moyenne de  $\Delta E^r$  est :

$$\langle \Delta E^r \rangle = \langle n l j | \frac{-p^4}{8m_0^3 c^2} | n l j \rangle$$

où  $|n l j\rangle$  est le vecteur d'état, normé, de l'électron.

Les opérateurs, indépendants de l'angle solide, ne s'exercent que sur la partie radiale de la fonction d'onde :

$$\langle \Delta E^r \rangle = \frac{-1}{2m_0 c^2} \left[ E_n^2 + 2E_n Z e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + Z^2 e^4 \left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle \right]$$

Les valeurs de  $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$ ,  $\left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle [1]$  et la relation (9) conduisent à l'expression suivante :

$$\langle \Delta E^r \rangle = E_n \left[ \frac{n}{1+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \left( \frac{Z\alpha}{n} \right)^2 \quad (16)$$

avec 
$$E_n = - \frac{1}{2} m_0 c^2 \left( \frac{Z\alpha}{n} \right)^2$$

Cette correction est proportionnelle à  $(Z\alpha)^2$ . Elle est négligeable pour les éléments légers mais devient importante pour les éléments lourds.

### 2.1.2.- Correction spin-orbite.

Dans le référentiel lié à l'électron, le noyau effectue un mouvement autour de l'électron, créant ainsi un courant électrique. L'électron est soumis à un champ magnétique. Il existe donc une interaction, dite couplage spin-orbite, du moment magnétique de spin et du champ magnétique.

Ce couplage se traduit par la relation suivante [6] :

$$\Delta E^s = \frac{1}{2m_0^2 c^2} \left( \frac{1}{r} \right) \frac{dV(r)}{dr} (\vec{s} \cdot \vec{r})$$



avec  $V = -\frac{Ze^2}{r}$  ; elle devient :

$$\Delta E^S = \frac{Ze^2}{2m_0^2 c^2} \left(\frac{1}{r^3}\right) (\vec{s} \cdot \vec{l})$$

Le modèle vectoriel ( $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ ) permet d'évaluer  $(\vec{s} \cdot \vec{l})$  tel que :

$$\vec{s} \cdot \vec{l} = \frac{1}{2} (j^2 - l^2 - s^2)$$

si  $q$  est la valeur propre de l'opérateur  $(s.l)$ , et  $s = \frac{1}{2}$ , elle vaut :

$$q = \begin{cases} 1 & \text{pour } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & \text{pour } j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

La valeur moyenne de  $\Delta E^S$  sera :

$$\begin{aligned} \langle \Delta E^S \rangle &= \frac{Ze^2}{2m_0^2 c^2} \times \frac{\hbar^2 q}{2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \\ &= \frac{1}{4} m_0 c^2 \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2 \frac{nq}{1(l+\frac{1}{2})(l+1)} \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2 \end{aligned} \quad (17)$$

Finalement, l'expression (15) de l'énergie devient :

$$E_{nlj} = E_n \left[ 1 + \left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right) \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2 \right] \quad (18)$$

Cette relation traduit l'existence de la structure fine des niveaux. La subdivision a lieu avec deux valeurs différentes de  $j \pm$  pour  $n (\neq 1)$  et  $l (l \neq 0)$  donnés, l'écart est :

$$\Delta E = E_{nlj+} - E_{nlj-} = E_n \frac{n}{1(l+1)} \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2$$

Il est important avec les fortes valeurs de  $Z$  ou les faibles valeurs de  $n$ . D'autre part, la différence entre les droites de MOSELEY et les courbes paraboliques est d'ue au terme correctif proportionnel à  $(Z\alpha)^2$  [Fig. 1] .



En fait, la formule (18) représente l'expression approchée de celle de DIRAC que nous allons développer.

## 2.2.- Développement en série de $E_{nlj}$ .

L'expression de l'énergie (14) peut être développée en série de  $(\alpha Z)$ . Cette série est convergente [3] .

$$\begin{aligned} \frac{E_{nlj}}{hc} = Ry \left\{ \left( \frac{Z}{n} \right)^2 + \alpha^2 \left[ X - \frac{3}{4} \right] \left( \frac{Z}{n} \right)^4 \right. \\ \left. + \alpha^4 \left[ \frac{1}{4} X^3 + \frac{3}{4} X^2 - \frac{3}{2} X + \frac{5}{8} \right] \left( \frac{Z}{n} \right)^6 \right. \\ \left. + \alpha^6 \left[ \frac{1}{8} X^5 + \frac{3}{8} X^4 + \frac{1}{8} X^3 - \frac{15}{8} X^2 + \frac{15}{8} X - \frac{35}{4} \right] \left( \frac{Z}{n} \right)^8 + \dots \right\} \quad (19) \end{aligned}$$

avec  $X = \left( \frac{n}{j+\frac{1}{2}} \right)$  et Ry étant la constante de RYDBERG

Les deux premiers termes de cette formule sont identiques à ceux de la formule (18). Les suivants sont moins évidents. Nous pensons qu'ils proviennent probablement du couplage spin du noyau et de l'électron (hyperstructure). Les couplages j-j n'interviennent certainement pas puisque le système étudié est monoélectronique.

En pratique, cette formule sera simplifiée dans les cas suivants :

- Elle est équivalente à celle de BOHR (8) ou (9) pour les éléments légers ou moyennement lourds. Par contre, il faut tenir compte des termes d'ordre supérieur pour les éléments très lourds.

- Elle est réduite à la formule de BOHR (8) si n est grand : la puissance de  $\alpha$  et de  $\left( \frac{Z}{n} \right)$  rend négligeable le terme correspondant.



En résumé, les études précédentes ne sont que des rappels de l'aspect énergétique de l'atome monoélectronique. La figure(2) montre que la différence entre les courbes théorique (DIRAC) et expérimentale augmente avec  $Z$ . Cette différence peut être réduite au moyen de coefficients d'écran, ce sera l'objet du chapitre suivant.



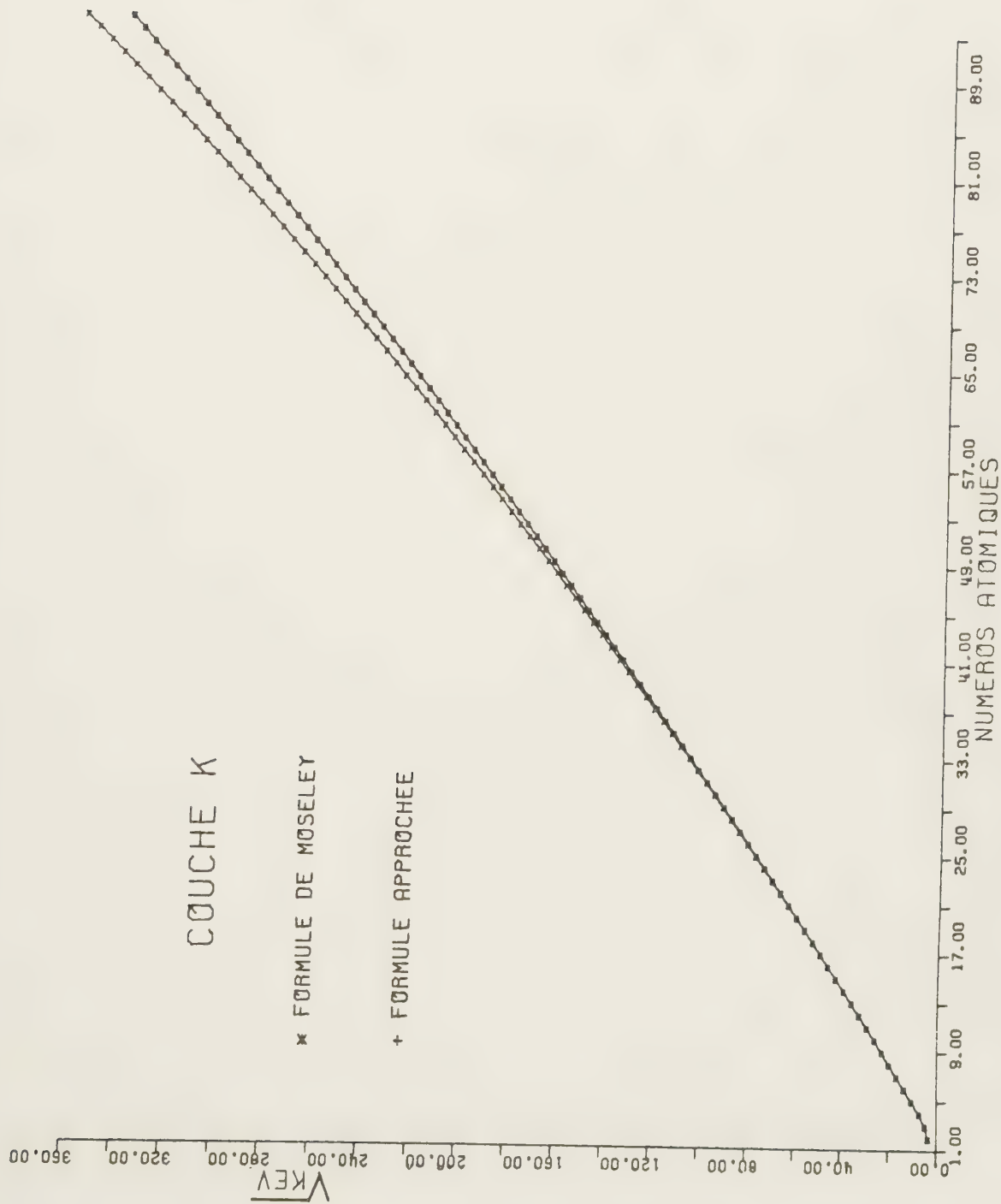


FIGURE : 1





FIGURE : 2



## CHAPITRE 2

### COEFFICIENT D'ECRAN

Les expressions (14) ou (19) permettent de connaître les niveaux d'énergie des atomes hydrogénéoïdes. Est-il possible de généraliser au cas de l'atome multiélectronique?

La réponse est basée sur le principe de réciprocité de PAULI [4] : l'absence d'un électron  $(n, l)$  doit donner naissance aux mêmes termes spectraux que la présence d'un seul électron  $(n, l)$ .

Le calcul de l'énergie de l'électron  $(n, l)$  d'un atome  $Z$  est donc le même que celui de l'énergie d'un électron  $(n, l)$  de l'atome hydrogénéoïde de charge  $Z$  à condition de tenir compte de la présence des autres électrons par l'introduction d'une constante  $s$  dite "coefficient d'écran".

#### 1.- INTRODUCTION DU COEFFICIENT D'ECRAN.

Ce coefficient est déterminé expérimentalement dans la relation semi empirique de MOSELEY :  $\sqrt{\nu} \propto c (Z-s)$ .

Il apparaît également dans le modèle d'orbite et d'orbitale :

- Puisque la distribution électronique des  $(Z-1)$  autres électrons d'un atome possède une symétrie sphérique dite "coeur" de l'atome, les orbites de l'électron considéré se distinguent, vis à vis de son coeur, en deux types :



- . orbite pénétrante
- . orbite non pénétrante

Le coeur constitue donc une sorte d'écran entre le noyau et l'électron. L'effet coulombien de l'électron est alors diminué. Il agit comme s'il possédait une charge apparente  $Z^*e$  inférieure à la charge réelle  $Ze$  telle que :

$$Z^*e = (Z - s) e \quad (20)$$

- en mécanique quantique ce coefficient intervient dans l'expression de la fonction d'onde mais est considéré comme un paramètre. L'hypothèse de l'orbitale monoélectronique permet de calculer l'énergie moyenne [7] de l'électron d'un atome simple comme celui de l'hélium. Cette énergie dépend du paramètre d'écran qui est calculé par la condition d'extrémum de l'énergie correspondant à l'état stable de l'atome.

J.C. SLATER généralise aux atomes multiélectroniques en imposant à chacun des électrons de l'atome une orbitale :

$$\psi_{nlm} = R_n(r) Y_l^m(\theta, \chi)$$

où la partie radiale  $R_n(r)$  ne dépend que de  $n$  :

$$R_n(r) = N r^{n-1} e^{-\frac{\gamma r}{2}} \quad \text{avec} \quad \frac{8\pi N^2}{\gamma^3} = 1 \quad (21)$$

Le choix de cette fonction impose l'expression de l'énergie potentielle du type (12) de sorte que l'électron, de  $r$  grand, se trouve dans le potentiel coulombien d'une charge  $Z^*e$  (20). Le schéma (page 10) représente l'équivalence de ces deux modèles.

La fonction de distribution radiale  $D(r) = 4\pi r^2 \psi \psi^*$  définit le degré de pénétration de l'électron vis à vis du coeur. Les orbites



3s, 3p qui sont aplaties (1 petit) pénètrent à l'intérieur du cœur et l'orbite 3d se trouve bien hors de celui-ci.

## 2.- LES DOUBLET

Certains auteurs introduisent le coefficient  $s'$  qui tient compte de l'effet d'écran mutuel des électrons de la couche en jeu,  $s'$  est constant. Le coefficient  $s$  a donc deux effets : l'un, dû aux électrons intérieurs et l'autre aux électrons extérieurs à la couche. Le coefficient  $s$  peut alors se décomposer en deux parties :

- une partie constante  $s'$
- une partie variable  $s_{n1}$ , due aux électrons extérieurs à la couche. Ceci nous conduit à formuler :

$$\begin{aligned} \frac{E_{n1j}}{hc} = Ry \left\{ \left( \frac{Z-s_{n1}}{s} \right) + \alpha^2 \left( X - \frac{3}{4} \right) \left( \frac{Z-s'}{n} \right)^4 \right. \\ + \alpha^4 \left( \frac{1}{4} X^3 + \frac{3}{4} X^2 - \frac{3}{2} X + \frac{5}{8} \right) \left( \frac{Z-s'}{n} \right)^6 \\ \left. + \alpha^6 \left( \frac{1}{8} X^5 + \frac{3}{8} X^4 + \frac{1}{8} X^3 - \frac{15}{8} X^2 + \frac{15}{8} X - \frac{35}{4} \right) \left( \frac{Z-s'}{n} \right)^8 + \dots \right\} \end{aligned}$$

Pour expliquer la structure fine des niveaux, nous distinguons deux types de doublets :

2.1.- Le doublet régulier est provoqué par le spin de l'électron.  $n$  et  $l$  ont même valeur mais  $j$  possède deux valeurs différentes de l'unité :  $j \pm = l \pm \frac{1}{2}$ . Ce sont les doublets  $L_{II}-L_{III}$  ;  $M_{II}-M_{III}$  ; etc...

Pour le doublet L,  $L_{II}$  ( $n=2$  ;  $l=1$  ;  $j = \frac{1}{2}$ ) et  $L_{III}$  ( $n=2$ ,  $l=2$ ,  $j = \frac{3}{2}$ ), la différence d'énergie  $(E_{n,j+1} - E_{n,j}) = P(n,j, (\frac{Z-s}{n}))$  est décrite par un polynôme en  $(\frac{Z-s}{n})$  de degré pair.

La relation suivante donne la loi de ce doublet en négligeant des termes d'ordre supérieur à 4.



$$\frac{\Delta E_{nl}}{Ryhc} \neq \frac{\alpha^2}{n^4} (Z-s')^4$$

2.2.- Le doublet irrégulier est défini par les mêmes valeurs de  $n$  et de  $j$ , mais celle de  $l$  est différente d'une unité. Le niveau d'énergie correspond à l'état  $(n, l, j)$  :

$$\sqrt{\frac{E_{nlj}}{Ryhc}} \neq \left( \frac{Z-s_{nl}}{n} \right) + \frac{1}{2} \alpha^2 \frac{(Z-s')^4}{n^3 (Z-s_{nl})} \left( \frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots$$

En négligeant les termes d'ordre supérieur, cette relation devient :

$$\sqrt{\frac{E_{nlj}}{Ryhc}} \neq \left( \frac{Z-s_{nl}}{n} \right)$$

La loi de HERTZ décrit l'écart entre les niveaux  $L_I - L_{II}$  ;  $M_I - M_{II}$  ;  $M_{III} - M_{IV}$  ; .... On doit donc s'attendre à ce que les deux coefficients  $s_{nl}$  et  $s_{nl'}$  soient différents:  $l' = (l+1)$ . La différence  $(s_{nl} - s_{nl'})$  s'exprime par :

$$\left( \sqrt{\frac{E_{nlj}}{Ryhc}} - \sqrt{\frac{E_{nl'j}}{Ryhc}} \right) \neq \frac{s_{nl} - s_{nl'}}{n} = \frac{\Delta s}{n}$$

Pour  $n, l, j$  donnés,  $\left( \frac{\Delta s}{n} \right)$  est à peu près indépendant du numéro atomique. Nous observons le parallélisme des courbes de MOSELEY et de  $\frac{\Delta s}{n}$  en fonction de  $Z$ .

Jusqu'ici, nous avons abordé l'étude théorique du modèle monoélectronique qui permet de mener à bien l'interprétation des phénomènes très complexes de l'atome. Des lois ont été trouvées au moyen du principe de réciprocité de PAULI. Reste à estimer la validité de ce modèle par le calcul des coefficients d'écran et à analyser son développement selon la structure électronique de l'atome. Ces points seront étudiés au prochain chapitre.



### CHAPITRE 3

#### MISE EN EVIDENCE DE LA LOI DE REMPLISSAGE DES COUCHES ELECTRONIQUES

J.C. SLATER a établi une méthode systématique pour évaluer le numéro atomique apparent  $Z_i^*$ , donc  $s_i$  d'un électron du groupe de rang  $i$  [7] .

$$Z_i^* = Z - \sum s_{ij}$$

posons  $s_i = \sum_j s_{ij}$  (22)

expression dans laquelle  $s_{ij}$  représente l'interaction de l'électron  $i$  avec un électron du groupe  $j$ . Le résultat n'est utilisable que pour les électrons externes à condition que la limite de l'orbitale atomique (21) soit vérifiée.

DUCANSON et COULSON ont complété ce travail pour les électrons internes [14].

Le principe de réciprocité de PAULI permet de calculer aisément les coefficients  $s$  ;  $s$  est inséré dans l'expression de l'énergie (14) :

$$E_{nlj} = f (Z - s, n, l, j) \quad (23)$$

De ce fait, la grandeur  $s$  ne permet que de prévoir grossièrement l'évolution de deux éléments consécutifs et représente



l'ordre de grandeur du nombre des électrons proches du noyau. Ces points seront examinés lors de la détermination des coefficients d'écran et des coefficients partiels d'écran.

#### 1.- CALCUL DES COEFFICIENTS D'ECRAN.

Récemment, BEARDEN [5] a publié une table très complète des niveaux d'énergie des éléments du tableau périodique. Ses données sont excellentes à hautes énergies. Des erreurs considérables apparaissent aux faibles énergies qui correspondent aux électrons externes de l'atome. Cette table peut être utilisée comme point de départ de notre étude.

Les formules (8), (14) et (19) sont employées en tenant compte de la relation (23).

Les résultats sont immédiats : les courbes (3), (4), (5), (6) représentent respectivement les allures du coefficient d'écran, en fonction de  $Z$ , des couches K, L, M, N. Parmi elles, celle de la couche K est la plus intéressante puisque les mesures d'énergie, quelque soit  $Z$ , sont précises, la description en sera plus rigoureuse. En conséquence, elle déterminera notre choix du modèle atomique.

La non validité du modèle de BOHR se manifeste nettement par la décroissance de la courbe pour les grandes valeurs de  $Z$ . Nous trouvons même des coefficients d'écran négatifs pour les éléments de  $Z$  supérieurs à 92. Nous nous attendions à ce que le coefficient d'écran augmente avec le numéro atomique: ceci caractérise sa propriété d'additivité (22). Cependant, ce modèle joue un rôle essentiel dans l'interprétation de certaines formules, en particulier celle de DIRAC. D'ailleurs, son utilisation est valable pour les éléments légers où les trois courbes se superposent (courbe 3).

C'est le modèle de DIRAC qui semble se rapprocher le plus de la réalité.



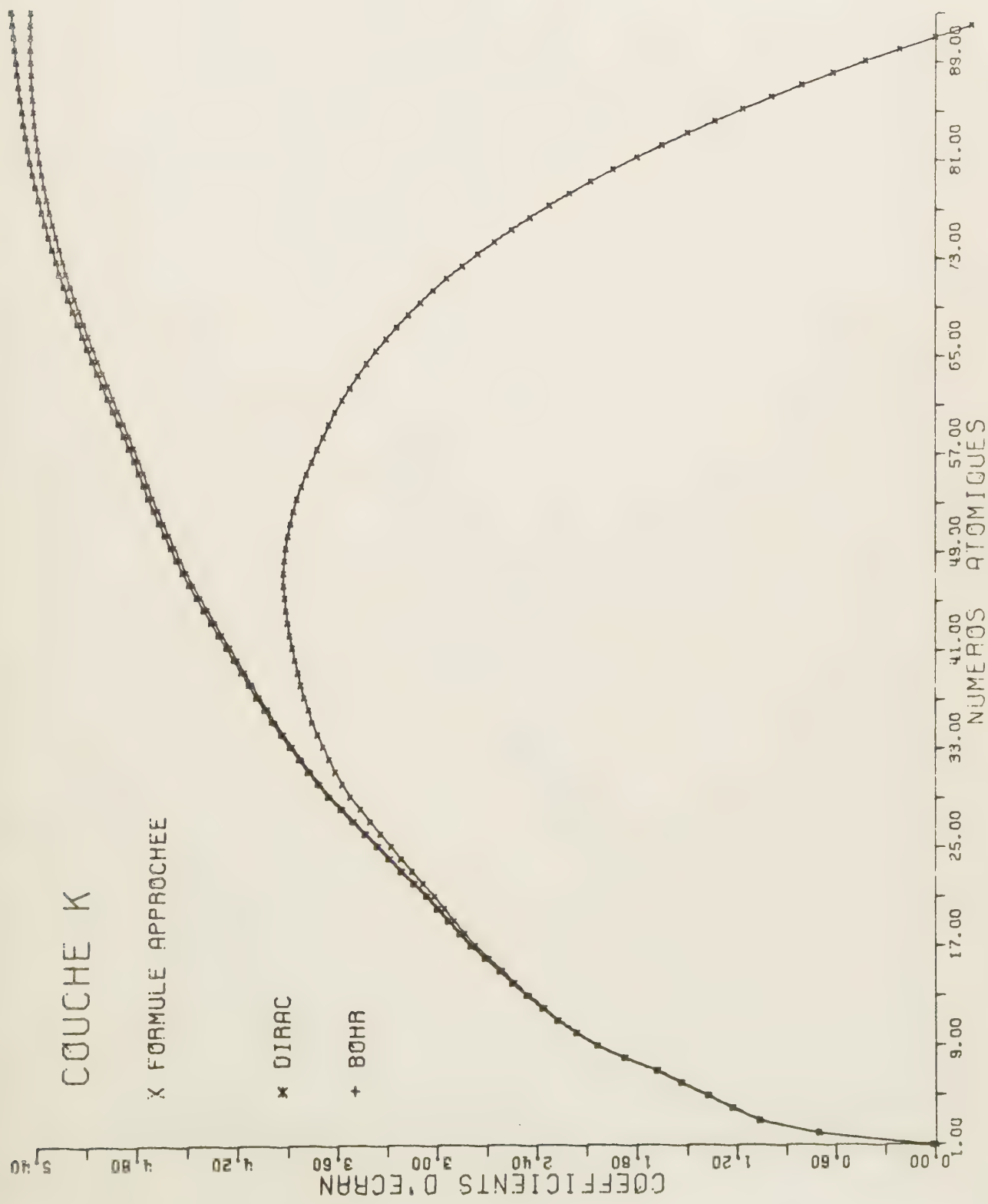


FIGURE : 3



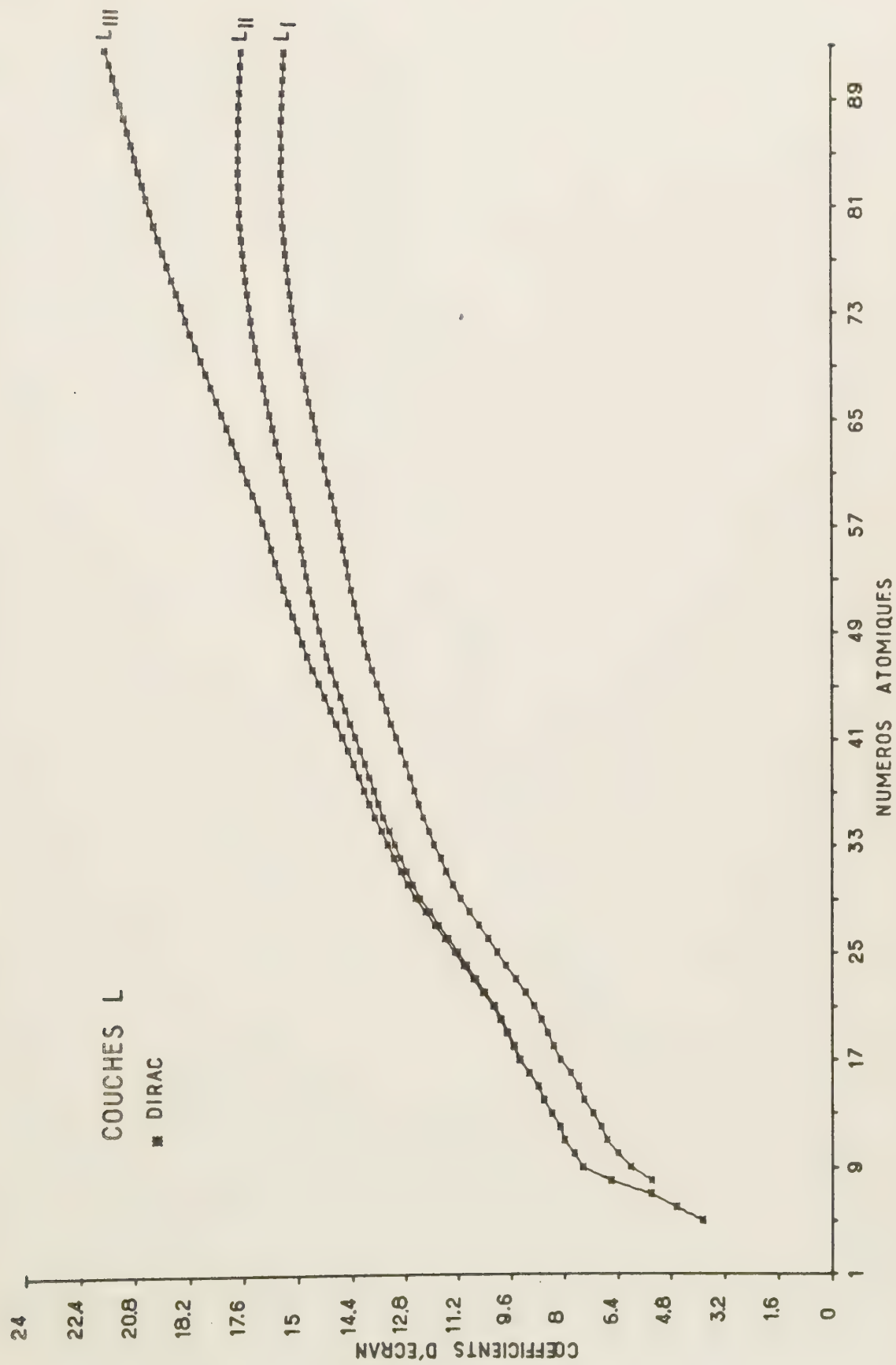
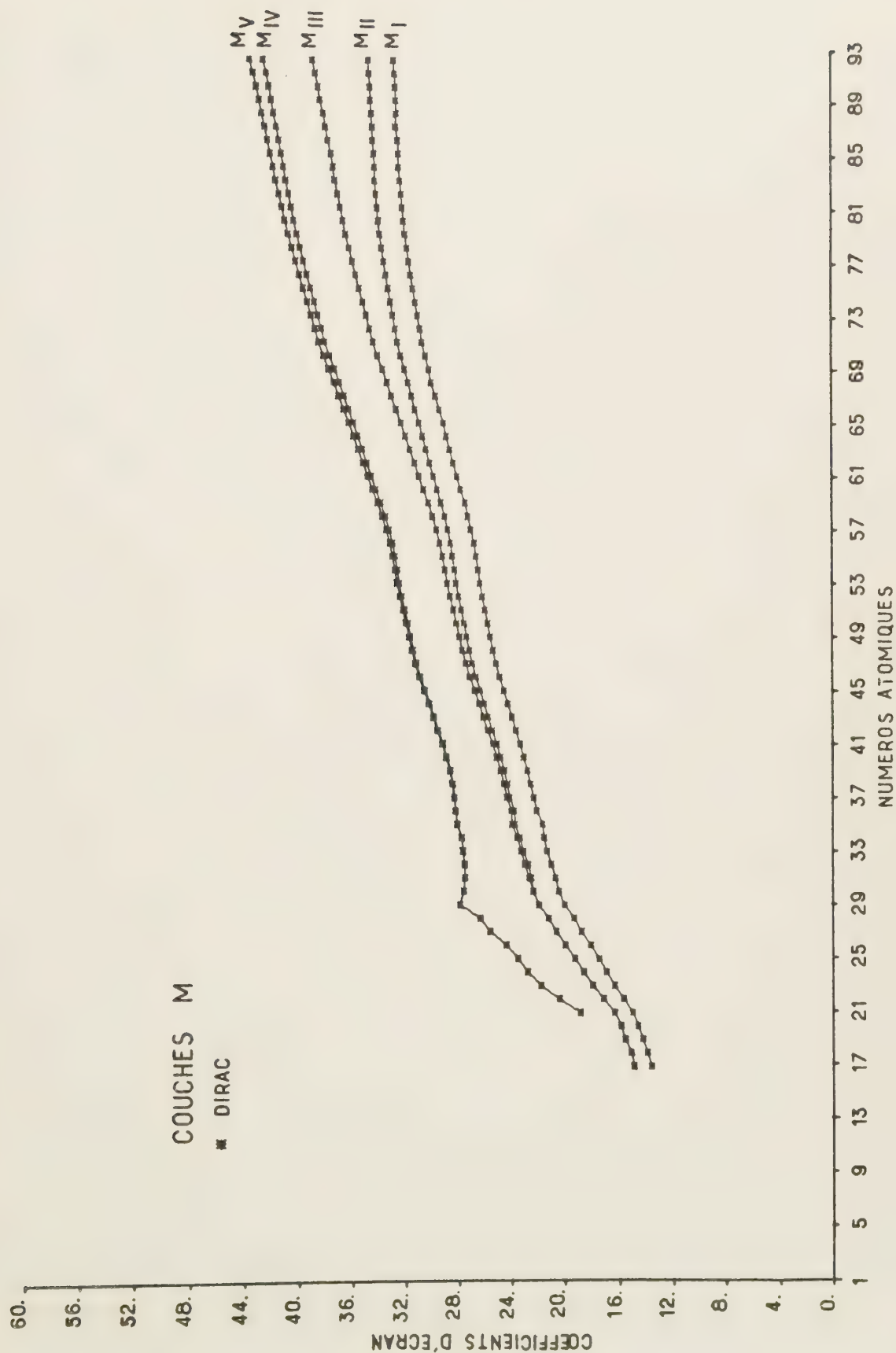


FIGURE:4







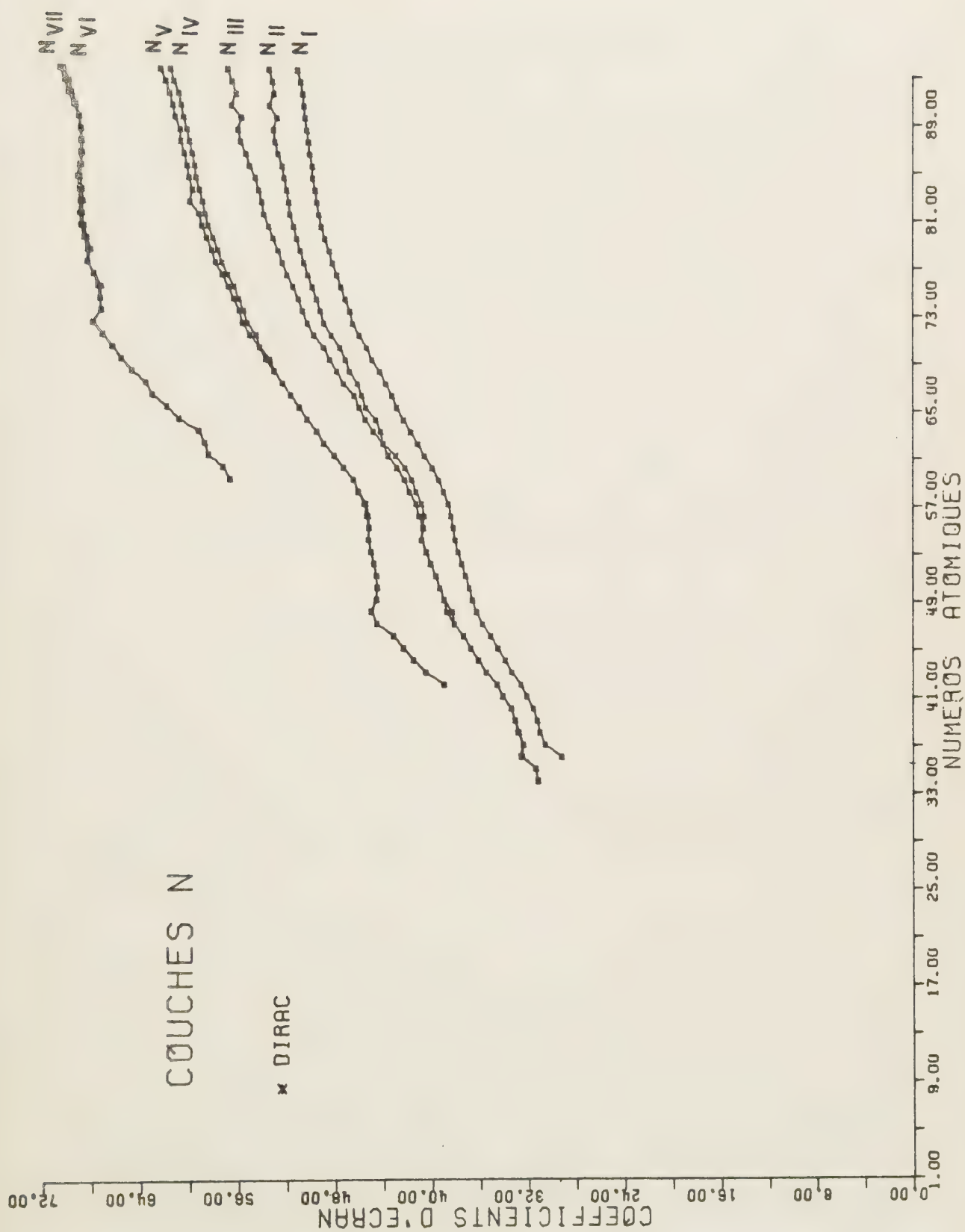


FIGURE : 6



Des changements de pente se manifestent aux éléments alcalins. L'explication est évidente : elle tient au peuplement des couches électroniques. Dans la région des éléments lourds, la courbe tend régulièrement vers une asymptote : tout se passe comme si la présence de la distribution électronique des électrons intermédiaires protégeait l'électron K de sorte que le peuplement progressif des électrons influe de moins en moins sur celui-ci. Des difficultés apparaissent pour les éléments très lourds pour lesquels la courbe décroît sensiblement. Il semble que les électrons 4f puissent être considérés comme "enterrés" dans l'atome vis à vis des électrons 5d et 6s et que les électrons 5f soient distribués, en réalité, sur des orbitales hybrides 5f, 6d [7]. En fait, il y a désaccord entre les différents auteurs au sujet de la structure électronique des éléments lourds. Nous nous en apercevrons lors de l'étude des coefficients partiels d'écran.

Pour les autres couches, les courbes 4, 5, 6 décrivent bien, en général, la loi de remplissage électronique : des changements brusques apparaissent aux numéros atomiques pour lesquels une nouvelle couche commence à se constituer. Dans le cas de  $M_{IV}$ , il existe un changement particulier au voisinage du cuivre. Il est dû probablement à la structure électronique anormale de cet élément et aux difficultés de mesurer des faibles énergies par la méthode d'absorption.

## 2.- COEFFICIENT PARTIEL D'ECRAN.

### 2.1.- Principe de calcul.

Le fait que le coefficient  $s_i$  du niveau  $i$  ( $i = 1, 2 \dots 24$ ) varie linéairement par morceau avec  $Z$  nous suggère de décomposer cette grandeur en fonction de la configuration électronique de l'atome. Par commodité, appelons  $q$  la variable représentée par un seul indice et associée au nombre d'électrons de la couche quantique  $(n, l)$  du tableau périodique des éléments. La correspondance



entre l'indice  $q$  et  $(n, l)$  figure dans le tableau ci-dessous :

| couches $(n, l)$ | 1s | 2s | 2p | 3s | 3p . . . | 7s |
|------------------|----|----|----|----|----------|----|
| indice $q$       | 1  | 2  | 3  | 4  | 5 . . .  | 18 |

Il est évident que pour un élément  $Z$ , nous avons :

$$Z = \sum_{q=1}^{18} X_q$$

et le coefficient d'écran du niveau  $i$  se décompose selon la relation :

$$s_i = (X_k - 1) s_{ik} + \sum_{q \neq k}^{18} X_q \cdot s_{iq}$$

La sommation s'effectue sur toutes les couches  $q$  de l'atome  $Z$ . Nous pouvons l'écrire sous la forme :

$$s_i = \sum_{q=1}^{k-1} X_q s_{iq} + (X_k - 1) s_{ik} + \sum_{q=k}^{18} X_q s_{iq}$$

Posons :  $s_{i0} = \sum_{q=1}^{k-1} X_q s_{iq}$

la relation (25) devient :

$$s_i = s_{i0} + (X_k - 1) s_{ik} + \sum_{q=k}^{18} X_q s_{iq} \quad (24)$$

Cette formule montre que l'extraction d'un électron de la couche  $X_k$  provoque l'apparition du niveau  $i$  de l'atome  $Z$ , avec la correspondance suivante :



| k                   | 1    | 2                  | 3                                           | 4                  | 5                                           | 6                                         | 7                   | 8                                             | 9                                           | 10                                            |
|---------------------|------|--------------------|---------------------------------------------|--------------------|---------------------------------------------|-------------------------------------------|---------------------|-----------------------------------------------|---------------------------------------------|-----------------------------------------------|
| Z                   | 1    | 3                  | 5                                           | 11                 | 13                                          | 21                                        | 19                  | 31                                            | 39                                          | 37                                            |
| i                   | 1(K) | 2(L <sub>I</sub> ) | 3(L <sub>II</sub> )<br>4(L <sub>III</sub> ) | 5(M <sub>I</sub> ) | 6(M <sub>II</sub> )<br>7(M <sub>III</sub> ) | 8(M <sub>IV</sub> )<br>9(M <sub>V</sub> ) | 10(N <sub>I</sub> ) | 11(N <sub>II</sub> )<br>12(N <sub>III</sub> ) | 13(N <sub>IV</sub> )<br>14(N <sub>V</sub> ) | 15(N <sub>IV</sub> )<br>16(N <sub>VII</sub> ) |
| $\overline{s}_{i0}$ | 0    | 1,697              | 0,965<br>0,965                              | 1,274              | 1,202<br>1,200                              | 0,947<br>0,947                            | 1,315               | 1,020<br>1,020                                | 0,971<br>0,971                              | 1,559<br>1,591                                |

A titre d'exemple, pour le potassium (Z = 19), le niveau L<sub>III</sub> (i = 4) est dû à un électron 2p (k = 3), le coefficient d'écran s<sub>4</sub> (19) se décompose en fonction de la structure électronique de cet atome :

$$s_4(19) = s_{40} + (6-1) s_{13} + 2 \cdot s_{44} + 6s_{45} + 0 \cdot s_{46} + 1s_{47}$$

avec  $s_{40} = 2s_{41} + 2s_{42}$

s<sub>ij</sub> est appelé "coefficient partiel d'écran", il ne faut pas le confondre avec le s<sub>ij</sub> de la relation (22). Il traduit l'influence d'un électron q sur l'électron k considéré. Nous différencions deux types de coefficients partiels d'écran :

- Pour q = k, s<sub>ik</sub> rend compte de l'influence mutuelle des électrons de la couche en jeu.

- Pour q ≠ k, s<sub>iq</sub> représente l'influence des électrons extérieurs à la couche.

De ce fait, la relation (24) justifie mathématiquement la raison pour laquelle des auteurs font intervenir un coefficient s' différent de s lors de l'étude des doublets. Certaines lois qui concernent l'atome, seront retrouvées en interprétant les coefficients s<sub>iq</sub>.



## 2.2.- Discussion des résultats.

Le calcul de  $s_{iq}$  s'effectue à l'aide d'un programme qui utilise une méthode de régression linéaire progressive au sens des moindres carrés.

Ce programme possède des tests d'ajustements susceptibles d'éliminer les variables  $X_q$  qui ne contiennent aucune ou peu d'informations. Les degrés d'informations contenus dans les coefficients ajustés sont visualisés dans l'ordre décroissant par les symboles (\*\*), (\*), ( ) du tableau (1).

Nous y retrouvons des indications relatives aux coefficients d'écran :

- Les variables  $X_{14}$  (5f),  $X_{17}$  (6d),  $X_{18}$  (6s) ne fournissent presque aucunes informations. Ceci correspond probablement aux états hybrides de ces électrons.

- Les niveaux  $N_{IV}$  et supérieurs ne sont pas interprétables pour les raisons énoncées précédemment.

Le tableau (2) résume nos résultats. Les constantes  $s_{i0}$  figurent en dernière colonne.

Les valeurs négatives qui se situent dans les colonnes  $X_{14}$ ,  $X_{17}$ ,  $X_{18}$ , sont pratiquement nulles. Elles ne modifient donc guère la distribution des électrons internes des atomes lourds.

Compte tenu des résultats obtenus au cours des calculs, il est évident que les deux coefficients  $s_{ik}$  de même  $k$  tel que  $k = 3, 5, 6, 8, 9, 10$  (voir le tableau ci-dessus) sont sensiblement égaux. Il s'agit de l'influence mutuelle des électrons de la même couche quantique  $(n, l)$  où  $l = k$ .



| Variables<br>Niveaux | X1 | X2 | X3 | X4 | X5 | X6 | X7 | X8 | X9 | X10 | X11 | X12 | X13 | X14 | X15 | X16 | X17 | X18 |
|----------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| K                    | ** | ** | ** | ** | ** | ** | ** | ** | ** | **  | **  | **  | **  |     | **  | **  |     |     |
| L <sub>I</sub>       |    |    | ** | ** | ** | ** | ** | ** | ** | **  | **  | **  | **  |     | **  |     |     |     |
| L <sub>II</sub>      |    |    | ** | ** | ** | ** | ** | ** | ** | **  | **  | **  | **  |     | **  |     |     |     |
| L <sub>III</sub>     |    |    | ** | *  | ** | ** | ** | ** | ** | **  | **  | **  | **  |     | **  |     |     | *   |
| M <sub>I</sub>       |    |    |    |    | ** | ** | ** | ** | ** | **  | **  | **  | **  |     | **  | **  |     |     |
| M <sub>II</sub>      |    |    |    |    |    | ** | ** | ** | ** | **  | **  | **  | **  |     | **  | **  |     |     |
| M <sub>III</sub>     |    |    |    |    |    | ** | ** | ** | ** | **  | **  | **  | **  |     | **  | **  | **  | **  |
| M <sub>IV</sub>      |    |    |    |    |    | ** |    |    | ** | **  | *   | **  | **  |     |     | **  |     |     |
| M <sub>V</sub>       |    |    |    |    |    | ** |    |    | ** | **  | **  | **  | **  | **  |     | **  |     |     |
| N <sub>I</sub>       |    |    |    |    |    |    |    | ** | ** | **  | **  | **  | *   | **  | **  | **  |     |     |
| N <sub>II</sub>      |    |    |    |    |    |    |    | ** | ** | **  | **  | **  | **  |     |     | **  |     |     |
| N <sub>III</sub>     |    |    |    |    |    |    |    | *  | ** | **  | *   | **  | **  |     |     | **  |     |     |
| N <sub>IV</sub>      |    |    |    |    |    |    |    |    | ** | **  |     | **  |     |     |     | **  |     | *   |
| N <sub>V</sub>       |    |    |    |    |    |    |    |    | ** | **  |     | *   | **  |     |     | **  | *   |     |
| N <sub>VI</sub>      |    |    |    |    |    |    |    |    |    | **  |     |     |     |     |     |     |     |     |
| N <sub>VII</sub>     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |     |     |     |     |     |     |     |

TABLEAU (1)  
 Visualisation des degrés d'informations de X<sub>q</sub> dans  
 l'ordre décroissant symbolisé par (\*\*), (\*), ( ).



En ce qui concerne les coefficients  $s_{iq}$  ( $q \neq 0$ ), nous observons des valeurs sensiblement égales des deux niveaux  $i$  de même nombre quantique  $j$  ( $L_I - L_{II}$  ;  $M_I - M_{II}$  ;  $M_{III} - M_{IV} \dots$ ). De ce fait, nous retrouvons la loi de HERTZ du doublet irrégulier. Nous constatons également la décroissance régulière de  $s_{iq}$  lorsque  $j$  croît,  $n$  et  $i$  étant fixés. Cette variation prévoit la modification électronique de l'atome lors du peuplement successif des électrons. Nous étudierons plus particulièrement le coefficient  $s_{1q}$  au paragraphe suivant.

La constante  $s_{i0}$  est définie par la relation :

$$s_{i0} = \sum_{q=1}^{k-1} X_q s_{iq}$$

Pour  $k = 1$ ,  $s_{10}$  est négligeable, nous comprenons qu'il n'existe aucun écran lorsque nous privons d'un électron  $K$  l'atome d'hydrogène. En revanche, nous observons des  $s_{i0}$  pratiquement égaux aux niveaux de même nombre quantique  $n$  et  $l$ .

Effectuons maintenant la division de  $s_{i0}$  par  $(Z - 1)$ . Les deux grandeurs  $i$  et  $Z$  se trouvent dans le tableau précédent.  $\bar{s}_{i0}$  représente alors la valeur moyenne du coefficient partiel d'écran qui est proche de 1 ; sauf pour  $i = 2, 4, 7$ . Elle a pour conséquence que l'effet d'écran des électrons internes devient total.

Il faut enfin noter que les coefficients  $s_{22}$ ,  $s_{45}$ ,  $s_{107}$  ne figurent pas dans le tableau (3). Ils peuvent être expliqués par l'absence de mesures des niveaux correspondantes des éléments  $Z = 3, 11, 14$ . Ces coefficients sont inclus dans les constantes  $s_{20}$ ,  $s_{40}$ ,  $s_{107}$ , comme nous le constatons, ces constantes sont plus grandes que 1.

### 2.3.- Remplissage des couches électroniques.

La couche  $K(i = 1)$  est particulièrement intéressante puisque les données sont complètes et précises. Ainsi, son interprétation sera rigoureuse.



Pour visualiser la variation de  $s_{1q}$ , la courbe  $s_{1q}$  est tracée en fonction de  $q$  croissant qui détermine la suite  $X_q$  (Fig. 7).

Si la loi de remplissage des couches s'effectue dans l'ordre de la suite  $X_q$ , nous devrions obtenir, pour les  $s_{1q}$  une suite décroissante monotone. Or, sur la courbe se manifestent des points irréguliers dans l'intervalle situé entre  $q = 9$  et  $q = 15$ .

La suite  $s_{1q}$  est monotone et décroissante si l'intervention de certains indices est convenablement effectuée (Fig. 8). C'est ainsi que nous décelons la loi de remplissage des couches.

En ce qui concerne l'effet d'écran, l'électron influence d'autant moins le niveau  $K$  que son énergie est plus faible. L'ordre des écrans partiels décroissants se trouve être :

$$5s > 4p > 6s > 5p > 4f > 5d \dots\dots$$

Ceux-ci représentent également l'ordre correspondant des énergies. Signalons qu'il aurait fallu trouver une interversion entre  $4s$  et  $3d$ . Cela est probablement dû aux anomalies des éléments de transitions.

#### 2.4.- Calcul des niveaux d'énergie.

L'utilisation du tableau (3) permet de déterminer les niveaux d'énergie d'un atome.

Le calcul est simple : la relation (24) donne le coefficient d'écran  $s_i$ . L'énergie relative à ce niveau s'obtient par l'équation (14) à condition de remplacer  $Z$  par  $(Z - s_i)$ .

Nos résultats sont reportés dans le tableau (4).

L'erreur relative  $D_i(Z)$  est définie par :

$$D_i(Z) = \frac{E_i^C(Z) - E_i^m(Z)}{E_i^C(Z)}$$



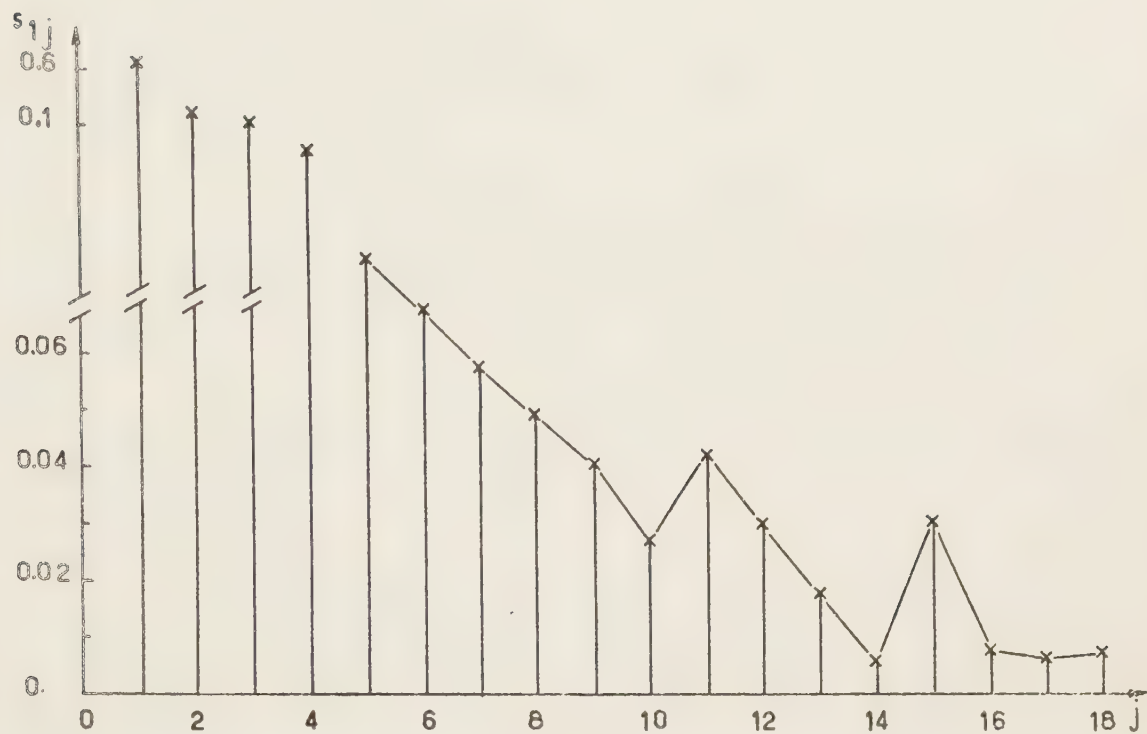


FIGURE : 7

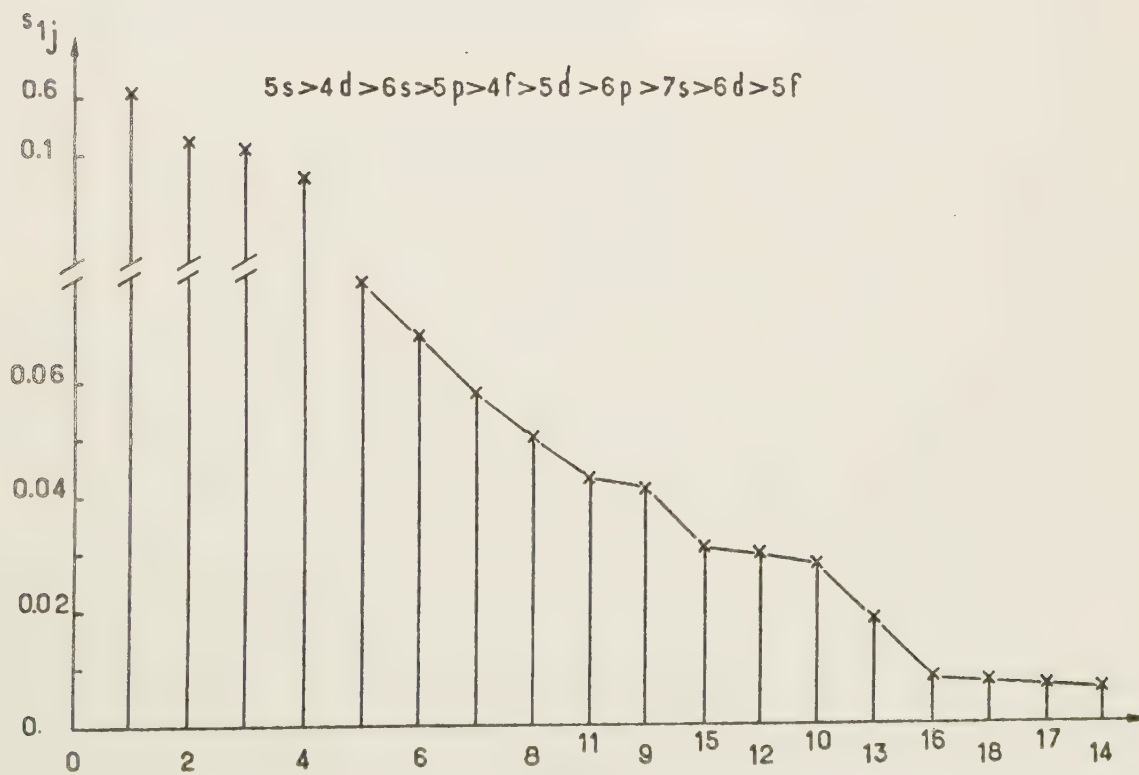


FIGURE : 8



Elle compare nos valeurs calculées ( $E_i^C(Z)$ ) avec les données expérimentales ( $E_i^m(Z)$ ) de BEARDEN [5]. Les figures (9), (10), (11) en montrent les variations.

En ce qui concerne la couche K ( $i = 1$ ), l'erreur est importante pour les éléments très légers ( $Z = 1, 2, 3, 4, 5$ ). Elle n'excède pas 8 % et diminue lorsque le numéro atomique augmente.

Des erreurs considérables sont observées pour les niveaux d'énergie des électrons externes. Ce cas correspond à la diagonale du tableau (3).

Plus précisément, nos valeurs sont moins bonnes dans le domaine des faibles énergies, c'est à dire pour les éléments légers et les éléments lourds possédant des niveaux de faible énergie.

Dans tous les autres cas, nos résultats représentent assez bien les valeurs expérimentales.



| COUCHES (n,l)    |  | 1s       | 2s       | 2p       | 3s       | 3p       | 3d       | 4s       | 4p        | 4d       | 4f       | 5s        | 5p       | 5d       | 5f        | 6s        | 6p         | 6d        | 7s         |
|------------------|--|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------|----------|----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|------------|-----------|------------|
| Variables        |  | X1       | X2       | X3       | X4       | X5       | X6       | X7       | X8        | X9       | X10      | X11       | X12      | X13      | X14       | X15       | X16        | X17       | X18        |
| niveaux          |  |          |          |          |          |          |          |          |           |          |          |           |          |          |           |           |            |           |            |
| K                |  | .6911130 | .2309270 | .1464000 | .0960942 | .779555  | .0682826 | .0588459 | .0506294  | .0410090 | .0224450 | .0429847  | .0302949 | .0184813 | .00619433 | .0307518  | .00376613  | .00680845 | .00751926  |
|                  |  |          |          | .5025230 | .2430040 | .2302500 | .2678940 | .1867760 | .1752390  | .1367140 | .0901263 | .1190570  | .0916152 | .0416585 | -.0170768 | .0843669  | .0051445   | .0174823  | -.00912956 |
| L <sub>I</sub>   |  |          |          |          |          |          |          |          |           |          |          |           |          |          |           |           |            |           |            |
| L <sub>II</sub>  |  |          |          | .8181800 | .0866227 | .2258510 | .2698590 | .1857760 | .1754320  | .1384450 | .0915511 | .1218510  | .0935635 | .0425508 | -.0184221 | .0853388  | -.00470139 | -.0213313 | -.00994726 |
| L <sub>III</sub> |  |          |          | .8176420 | .0836607 | .2308460 | .2801970 | .1962070 | .1921550  | .1669820 | .1539830 | .1483850  | .1327660 | .1304320 | .1098010  | .1076910  | .1073790   | .1021250  | .1038660   |
| M <sub>I</sub>   |  |          |          |          |          | .1768610 | .5969520 | .392565  | .262060   | .289680  | .2695300 | .2528510  | .1973150 | .153210  | .0431285  | .1366710  | .0576206   | .0159201  | .0416581   |
| M <sub>II</sub>  |  |          |          |          |          | .1255320 | .6551690 | .447725  | .2319090  | .2921930 | .2731240 | .2483480  | .1909360 | .1588300 | .0554251  | .1433320  | .0583636   | .0522941  | .0437586   |
| M <sub>III</sub> |  |          |          |          |          | .1281860 | .6609690 | .4483440 | .2656930  | .3151300 | .3403870 | .2483480  | .2315340 | .2532670 | .1915770  | .1587090  | .1785300   | .1877010  | .1782180   |
| N <sub>IV</sub>  |  |          |          |          |          |          | .9422650 | .2709420 | .00415059 | .2997250 | .3663290 | .2339620  | .2198440 | .2170290 | .1942740  | .1227290  | .199221    | .1710430  | .1553030   |
| N <sub>V</sub>   |  |          |          |          |          |          | .9417450 | .2684240 | .00872834 | .3080080 | .3756500 | .252047   | .2199190 | .2675310 | .2314030  | .0773075  | .2208450   | .1726840  | .1939450   |
| O <sub>I</sub>   |  |          |          |          |          |          |          |          | .1.146490 | .5434000 | .5395800 | .364977   | .3002170 | .3144600 | .1673240  | .1633320  | .1381420   | .1034870  | .1218330   |
| O <sub>II</sub>  |  |          |          |          |          |          |          |          | .3488110  | .5921280 | .5455760 | .378937   | .3392350 | .2990620 | .0948794  | .0463058  | .2165370   | .0891067  | .0449256   |
| O <sub>III</sub> |  |          |          |          |          |          |          |          | .3681060  | .5966840 | .6112370 | .336241   | .3395790 | .4105970 | .2104410  | .1106040  | .3203480   | .1787940  | .1271870   |
| O <sub>IV</sub>  |  |          |          |          |          |          |          |          |           | .8953300 | .6735320 | -.1168770 | .0911869 | .3668310 | .2994440  | .2965910  | .2124670   | .1993590  | .2265090   |
| N <sub>V</sub>   |  |          |          |          |          |          |          |          |           | .9956760 | .6943240 | -.1112570 | .0872121 | .4064829 | .3239550  | .2740210  | .215974    | .2436610  | .2265090   |
| P <sub>I</sub>   |  |          |          |          |          |          |          |          |           |          | .7846050 |           |          | .2584010 | .3145440  | .2181050  | -.0103275  | .3066410  | -.0108582  |
| P <sub>II</sub>  |  |          |          |          |          |          |          |          |           |          | .8372950 |           |          | .0798759 | .3767900  | -.1375370 | .1825840   | .4456800  | -.2624200  |
| P <sub>III</sub> |  |          |          |          |          |          |          |          |           |          |          |           |          |          |           |           |            |           |            |

TABLEAU (2)

Valeurs des coefficients partiels d'écran s<sub>ij</sub>



|   |    | 1 H     | 2HE     | 3LI     | 4RE     | 5 B     | 6 C     | 7 N      | 8 9       |
|---|----|---------|---------|---------|---------|---------|---------|----------|-----------|
|   |    |         |         |         |         |         |         |          |           |
| * | K  | 13.16   | 22.90   | 58.47   | 110.13  | 186.08  | 281.99  | 397.81   | 533.52*   |
| * | L1 | .00     | .00     | .49     | .97     | 3.90    | 8.26    | 14.62    | 22.90*    |
| * | L2 | .00     | .00     | .00     | .00     | 4.39    | 5.85    | 7.31     | 9.26*     |
| * | L3 | .00     | .00     | .00     | .00     | 4.39    | 5.85    | 7.31     | 9.26*     |
|   |    |         |         |         |         |         |         |          |           |
|   |    | 9 F     | 10NE    | 11NA    | 12MG    | 13AL    | 14SI    | 15 P     | 16 S      |
|   |    |         |         |         |         |         |         |          |           |
| * | K  | 889.09  | 864.94  | 1072.22 | 1302.13 | 1559.94 | 1841.16 | 2145.29  | 2473.18*  |
| * | L1 | 32.16   | 43.86   | 64.32   | 88.69   | 117.44  | 150.05  | 187.06   | 227.47*   |
| * | L2 | 11.69   | 14.13   | 29.72   | 51.17   | 73.58   | 99.89   | 130.56   | 165.65*   |
| * | L3 | 11.69   | 14.13   | 31.67   | 53.11   | 76.02   | 102.82  | 133.97   | 168.57*   |
| * | M1 | .00     | .00     | 4.39    | .49     | .00     | 1.46    | 5.36     | 11.21*    |
| * | M2 | .00     | .00     | .00     | .00     | 2.92    | .00     | .00      | 1.95*     |
| * | M3 | .00     | .00     | .00     | .00     | 2.92    | .00     | .00      | 1.95*     |
|   |    |         |         |         |         |         |         |          |           |
|   |    | 17CL    | 18 A    | 19 K    | 20CA    | 21SC    | 22TI    | 23 V     | 24CR      |
|   |    |         |         |         |         |         |         |          |           |
| * | K  | 2824.73 | 3199.39 | 3606.64 | 4038.17 | 4489.58 | 4965.96 | 5465.80  | 5985.10*  |
| * | L1 | 272.76  | 321.92  | 377.86  | 439.17  | 497.55  | 559.77  | 625.89   | 688.11*   |
| * | L2 | 204.11  | 246.96  | 296.61  | 351.12  | 403.66  | 459.61  | 519.42   | 575.82*   |
| * | L3 | 207.52  | 250.34  | 299.53  | 353.04  | 405.12  | 460.09  | 518.93   | 573.87*   |
| * | M1 | 19.00   | 28.75   | 37.52   | 47.27   | 54.58   | 61.89   | 70.17    | 74.07*    |
| * | M2 | 6.33    | 12.67   | 18.03   | 24.36   | 38.50   | 43.86   | 49.70    | 52.14*    |
| * | M3 | 6.33    | 13.16   | 23.39   | 30.70   | 45.81   | 51.65   | 57.50    | 59.94*    |
| * | M4 | .00     | .00     | .00     | .00     | 4.39    | 4.87    | 4.87     | 1.95*     |
| * | M5 | .00     | .00     | .00     | .00     | 4.39    | 4.87    | 4.87     | 1.95*     |
| * | N1 | .00     | .00     | .00     | .00     | 5.85    | 1.95    | .00      | .00*      |
|   |    |         |         |         |         |         |         |          |           |
|   |    | 25MN    | 26FE    | 27CO    | 28NI    | 29CU    | 30ZN    | 31GA     | 32GE      |
|   |    |         |         |         |         |         |         |          |           |
| * | K  | 6539.45 | 7113.42 | 7711.60 | 8334.78 | 8975.72 | 9655.33 | 10366.80 | 11104.26* |
| * | L1 | 769.25  | 846.48  | 927.59  | 1012.07 | 1090.68 | 1193.04 | 1301.15  | 1414.60*  |
| * | L2 | 650.20  | 721.65  | 795.99  | 874.65  | 947.02  | 1042.65 | 1144.03  | 1250.26*  |
| * | L3 | 647.30  | 716.77  | 789.65  | 865.91  | 936.33  | 1029.52 | 1128.04  | 1230.38*  |
| * | M1 | 87.71   | 96.97   | 107.20  | 117.92  | 122.80  | 140.31  | 162.72   | 186.57*   |
| * | M2 | 62.37   | 69.20   | 76.50   | 83.81   | 87.22   | 100.38  | 120.36   | 141.77*   |
| * | M3 | 71.14   | 78.45   | 85.76   | 93.56   | 96.97   | 110.61  | 130.56   | 152.00*   |
| * | M4 | 5.85    | 5.85    | 6.33    | 6.82    | 3.41    | 7.80    | 16.08    | 27.29*    |
| * | M5 | 5.85    | 5.85    | 6.33    | 6.82    | 3.41    | 7.80    | 16.08    | 27.29*    |
| * | N1 | 1.46    | 4.39    | 9.26    | 15.59   | 23.88   | 34.11   | 45.32    | 43.86*    |
| * | N2 | .00     | .00     | .00     | .00     | .00     | .00     | .00      | .49*      |
| * | N3 | .00     | .00     | .00     | .00     | .00     | .00     | .00      | .49*      |

- TABLEAU (3) -



| Table 1: Data for 33AS, 34SE, 35RR, 36KR, 37RB, 38SR, 39 Y, 40ZR |  |          |          |          |          |          |          |          |          |
|------------------------------------------------------------------|--|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
|                                                                  |  | 33AS     | 34SE     | 35RR     | 36KR     | 37RB     | 38SR     | 39 Y     | 40ZR     |
| K                                                                |  | 11867.87 | 12657.92 | 13474.10 | 14317.08 | 15193.89 | 16098.24 | 17031.65 | 17992.82 |
| L1                                                               |  | 1532.31  | 1655.81  | 1783.08  | 1916.14  | 2063.12  | 2215.83  | 2370.85  | 2531.56  |
| L2                                                               |  | 1361.27  | 1477.10  | 1597.70  | 1723.09  | 1861.96  | 2006.57  | 2153.97  | 2306.61  |
| L3                                                               |  | 1337.03  | 1448.50  | 1564.78  | 1684.83  | 1816.49  | 1953.36  | 2092.12  | 2235.62  |
| M1                                                               |  | 212.40   | 239.66   | 268.37   | 299.04   | 331.63   | 366.20   | 400.25   | 436.25   |
| M2                                                               |  | 165.16   | 190.47   | 217.24   | 246.48   | 276.17   | 308.27   | 339.43   | 372.53   |
| M3                                                               |  | 174.91   | 199.73   | 226.01   | 253.76   | 284.42   | 316.56   | 347.22   | 379.32   |
| M4                                                               |  | 41.91    | 58.96    | 79.43    | 102.82   | 122.80   | 144.69   | 166.14   | 189.01   |
| M5                                                               |  | 41.42    | 58.96    | 78.94    | 102.33   | 121.82   | 142.75   | 173.93   | 196.80   |
| N1                                                               |  | 41.91    | 40.45    | 38.50    | 37.03    | 44.34    | 52.63    | 66.76    | 73.58    |
| N2                                                               |  | 1.95     | 4.39     | 7.31     | 11.21    | 18.03    | 23.39    | 33.14    | 37.52    |
| N3                                                               |  | 1.95     | 4.39     | 7.31     | 10.72    | 17.54    | 22.90    | 32.65    | 37.03    |
| N4                                                               |  | .00      | .00      | .00      | .00      | .00      | .97      | 3.90     | 4.39     |
| N5                                                               |  | .00      | .00      | .00      | .00      | .00      | .97      | 3.90     | 4.39     |
| Table 2: Data for 41NB, 42MB, 43TC, 44RU, 45RH, 46PD, 47AG, 48CD |  |          |          |          |          |          |          |          |          |
|                                                                  |  | 41NB     | 42MB     | 43TC     | 44RU     | 45RH     | 46PD     | 47AG     | 48CD     |
| K                                                                |  | 18983.73 | 20001.22 | 21044.54 | 22120.44 | 23222.72 | 24356.28 | 25514.50 | 26701.36 |
| L1                                                               |  | 2694.10  | 2865.20  | 3045.83  | 3224.88  | 3412.94  | 3602.32  | 3805.94  | 4015.14  |
| L2                                                               |  | 2461.09  | 2624.66  | 2796.77  | 2967.81  | 3147.40  | 3329.28  | 3523.50  | 3723.84  |
| L3                                                               |  | 2380.50  | 2533.48  | 2694.56  | 2853.63  | 3020.80  | 3188.79  | 3369.67  | 3555.69  |
| M1                                                               |  | 471.76   | 510.68   | 552.98   | 592.85   | 636.10   | 678.89   | 727.95   | 778.02   |
| M2                                                               |  | 405.12   | 441.12   | 481.02   | 517.96   | 558.31   | 597.72   | 644.38   | 692.50   |
| M3                                                               |  | 409.51   | 444.53   | 484.40   | 518.93   | 557.82   | 594.31   | 640.48   | 688.11   |
| M4                                                               |  | 211.42   | 236.73   | 266.91   | 292.71   | 323.38   | 352.10   | 388.10   | 426.53   |
| M5                                                               |  | 219.19   | 245.50   | 275.20   | 301.48   | 332.12   | 361.32   | 396.84   | 434.78   |
| N1                                                               |  | 78.45    | 85.76    | 96.97    | 102.32   | 111.10   | 116.46   | 129.59   | 143.23   |
| N2                                                               |  | 39.96    | 44.83    | 52.63    | 55.55    | 61.40    | 58.47    | 73.58    | 83.81    |
| N3                                                               |  | 38.98    | 43.86    | 52.14    | 54.09    | 59.45    | 57.01    | 71.63    | 82.35    |
| N4                                                               |  | 1.46     | 1.95     | 5.85     | 2.44     | 2.44     | .49      | 3.41     | 8.28     |
| N5                                                               |  | 1.46     | 1.95     | 5.85     | 2.44     | 2.44     | .49      | 3.41     | 8.28     |
| Table 3: Data for 49IN, 50SN, 51RB, 52TE, 53 I, 54XE, 55CG, 56BA |  |          |          |          |          |          |          |          |          |
|                                                                  |  | 49IN     | 50SN     | 51RB     | 52TE     | 53 I     | 54XE     | 55CG     | 56BA     |
| K                                                                |  | 27933.80 | 29196.83 | 30490.34 | 31814.18 | 33169.52 | 34556.22 | 35973.59 | 37422.79 |
| L1                                                               |  | 4237.13  | 4465.15  | 4700.15  | 4941.11  | 5189.02  | 5443.39  | 5706.07  | 5976.05  |
| L2                                                               |  | 3936.96  | 4156.12  | 4381.83  | 4614.02  | 4851.73  | 5096.86  | 5350.34  | 5610.25  |
| L3                                                               |  | 3749.75  | 3949.42  | 4154.69  | 4364.59  | 4580.03  | 4800.59  | 5033.33  | 5271.13  |
| M1                                                               |  | 834.36   | 892.62   | 952.83   | 1015.45  | 1079.50  | 1145.50  | 1229.89  | 1316.69  |
| M2                                                               |  | 746.44   | 802.29   | 860.58   | 920.31   | 982.92   | 1047.00  | 1117.35  | 1190.11  |
| M3                                                               |  | 738.64   | 791.11   | 845.51   | 901.36   | 959.62   | 1019.35  | 1086.78  | 1156.16  |
| M4                                                               |  | 466.88   | 509.70   | 553.96   | 600.13   | 648.25   | 698.32   | 756.64   | 817.37   |
| M5                                                               |  | 475.66   | 518.45   | 563.18   | 609.39   | 657.99   | 708.03   | 769.73   | 834.36   |
| N1                                                               |  | 158.83   | 175.88   | 193.39   | 211.91   | 230.88   | 250.83   | 275.68   | 301.97   |
| N2                                                               |  | 95.51    | 107.69   | 120.85   | 134.46   | 149.08   | 164.19   | 187.55   | 212.88   |
| N3                                                               |  | 100.38   | 112.56   | 126.18   | 140.31   | 154.93   | 170.52   | 192.91   | 215.81   |
| N4                                                               |  | 14.62    | 21.44    | 30.21    | 39.96    | 51.65    | 64.32    | 75.04    | 86.74    |
| N5                                                               |  | 14.62    | 21.93    | 30.21    | 40.45    | 51.65    | 64.81    | 76.02    | 88.20    |



| Table 1: Data for 1990-1995 |  |          |          |          |          |          |          |          |          |  |
|-----------------------------|--|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|--|
|                             |  | 7LA      | 8ACF     | 9APR     | 6CND     | 61PM     | 62SM     | 63FU     | 64GD     |  |
| K                           |  | 38923.03 | 40441.06 | 41991.68 | 43576.10 | 45193.63 | 46845.02 | 48531.04 | 50251.20 |  |
| L1                          |  | 6265.29  | 6547.52  | 6836.09  | 7131.42  | 7434.00  | 7743.76  | 8060.22  | 8384.30  |  |
| L2                          |  | 5890.38  | 6162.11  | 6441.60  | 6726.97  | 7019.59  | 7318.96  | 7625.56  | 7938.89  |  |
| L3                          |  | 5508.71  | 5744.65  | 5986.07  | 6232.00  | 6483.41  | 6739.76  | 7001.10  | 7267.37  |  |
| M1                          |  | 1393.74  | 1462.08  | 1531.82  | 1603.52  | 1677.10  | 1751.65  | 1828.58  | 1906.95  |  |
| M2                          |  | 1263.85  | 1329.29  | 1396.66  | 1465.46  | 1535.69  | 1608.36  | 1682.43  | 1758.41  |  |
| M3                          |  | 1220.20  | 1277.89  | 1336.54  | 1397.15  | 1458.67  | 1521.65  | 1586.07  | 1651.94  |  |
| M4                          |  | 873.68   | 920.31   | 968.37   | 1017.89  | 1068.35  | 1120.28  | 1173.15  | 1227.45  |  |
| M5                          |  | 886.81   | 933.40   | 981.00   | 1030.01  | 1079.99  | 1130.94  | 1183.32  | 1236.68  |  |
| N1                          |  | 324.84   | 358.89   | 374.94   | 391.99   | 409.02   | 426.04   | 444.04   | 462.04   |  |
| N2                          |  | 231.86   | 261.07   | 274.71   | 288.81   | 303.43   | 318.50   | 333.58   | 349.17   |  |
| N3                          |  | 232.35   | 261.55   | 273.25   | 284.91   | 297.58   | 309.73   | 322.89   | 336.02   |  |
| N4                          |  | 104.77   | 124.75   | 131.54   | 138.85   | 145.67   | 152.98   | 160.78   | 168.57   |  |
| N5                          |  | 106.23   | 126.18   | 132.51   | 138.85   | 145.67   | 152.49   | 159.80   | 167.11   |  |
|                             |  |          |          |          |          |          |          |          |          |  |
|                             |  | 65TB     | 66DS     | 67WB     | 68ER     | 69TM     | 70YB     | 71LU     | 72HF     |  |
|                             |  |          |          |          |          |          |          |          |          |  |
| K                           |  | 52006.97 | 53798.18 | 55625.03 | 57488.36 | 59388.27 | 61325.52 | 63300.11 | 65334.18 |  |
| L1                          |  | 8715.50  | 9053.77  | 9399.60  | 9752.88  | 10113.17 | 10481.84 | 10857.45 | 11262.29 |  |
| L2                          |  | 8259.34  | 8587.41  | 8922.09  | 9264.80  | 9614.52  | 9971.77  | 10336.41 | 10729.05 |  |
| L3                          |  | 7539.00  | 7815.57  | 8097.50  | 8384.30  | 8675.94  | 8973.37  | 9275.12  | 9591.07  |  |
| M1                          |  | 1986.74  | 2066.42  | 2151.57  | 2236.60  | 2323.52  | 2411.87  | 2501.62  | 2608.25  |  |
| M2                          |  | 1835.83  | 1915.66  | 1996.88  | 2079.54  | 2164.60  | 2251.06  | 2338.96  | 2443.73  |  |
| M3                          |  | 1719.22  | 1787.44  | 1857.61  | 1928.72  | 2001.24  | 2075.21  | 2150.10  | 2237.05  |  |
| M4                          |  | 1283.22  | 1339.95  | 1398.12  | 1457.24  | 1517.30  | 1579.30  | 1642.26  | 1722.11  |  |
| M5                          |  | 1291.47  | 1347.23  | 1404.40  | 1463.06  | 1522.14  | 1583.17  | 1644.66  | 1718.73  |  |
| N1                          |  | 480.53   | 499.47   | 518.45   | 538.39   | 557.82   | 578.26   | 599.15   | 630.28   |  |
| N2                          |  | 365.22   | 381.27   | 398.30   | 415.32   | 432.83   | 450.35   | 468.35   | 497.55   |  |
| N3                          |  | 349.17   | 362.79   | 376.40   | 390.53   | 405.12   | 419.71   | 434.30   | 457.66   |  |
| N4                          |  | 176.37   | 184.62   | 192.91   | 201.19   | 209.96   | 218.70   | 227.47   | 245.50   |  |
| N5                          |  | 174.42   | 181.70   | 189.49   | 197.29   | 205.58   | 213.37   | 221.63   | 238.19   |  |
|                             |  |          |          |          |          |          |          |          |          |  |
|                             |  | 73TA     | 74W      | 75E      | 76BS     | 77IR     | 78PT     | 79AU     | 80HG     |  |
|                             |  |          |          |          |          |          |          |          |          |  |
| K                           |  | 67407.81 | 69521.56 | 71675.81 | 73871.19 | 76108.94 | 78417.56 | 80741.44 | 83079.19 |  |
| L1                          |  | 11675.33 | 12097.45 | 12528.12 | 12968.23 | 13417.73 | 13896.85 | 14365.41 | 14822.03 |  |
| L2                          |  | 11130.36 | 11540.38 | 11959.00 | 12386.65 | 12823.32 | 13289.27 | 13744.64 | 14189.04 |  |
| L3                          |  | 9912.71  | 10239.56 | 10572.05 | 10909.71 | 11252.97 | 11592.49 | 11946.90 | 12316.12 |  |
| M1                          |  | 2717.25  | 2828.11  | 2941.31  | 3056.89  | 3174.84  | 3274.92  | 3397.08  | 3542.26  |  |
| M2                          |  | 2550.35  | 2659.84  | 2771.70  | 2886.40  | 3002.98  | 3120.45  | 3242.21  | 3368.69  |  |
| M3                          |  | 2325.92  | 2416.22  | 2508.38  | 2601.97  | 2697.94  | 2782.79  | 2882.07  | 2995.28  |  |
| M4                          |  | 1803.43  | 1886.63  | 1972.24  | 2059.25  | 2148.67  | 2228.86  | 2321.60  | 2427.80  |  |
| M5                          |  | 1794.72  | 1871.65  | 1950.95  | 2031.69  | 2113.86  | 2175.72  | 2260.75  | 2370.36  |  |
| N1                          |  | 662.84   | 695.88   | 729.41   | 763.92   | 799.85   | 828.03   | 864.94   | 910.59   |  |
| N2                          |  | 526.73   | 556.88   | 588.46   | 620.56   | 653.61   | 675.47   | 709.98   | 758.10   |  |
| N3                          |  | 481.50   | 505.32   | 530.60   | 555.42   | 581.67   | 594.80   | 621.54   | 663.32   |  |
| N4                          |  | 264.48   | 283.94   | 303.92   | 324.35   | 346.25   | 365.71   | 388.58   | 414.35   |  |
| N5                          |  | 255.71   | 273.25   | 291.73   | 310.71   | 330.66   | 346.25   | 367.17   | 392.97   |  |



| Table 1: 10-Column Data Set A |  |           |           |           |           |           |           |           |           |
|-------------------------------|--|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
|                               |  | #1TL      | #2PR      | #3PI      | #4PB      | #5AT      | #6RN      | #7FR      | #8PA      |
| K                             |  | 85515.25  | 87997.63  | 90527.06  | 93104.31  | 95730.62  | 98407.13  | 101137.62 | 103920.19 |
| L1                            |  | 15328.27  | 15844.91  | 16372.34  | 16911.41  | 17461.13  | 18022.30  | 18603.49  | 19196.86  |
| L2                            |  | 14686.48  | 15194.81  | 15714.02  | 16244.00  | 16785.66  | 17338.36  | 17905.72  | 18484.47  |
| L3                            |  | 12691.27  | 13072.36  | 13459.33  | 13851.66  | 14250.32  | 14655.20  | 15067.26  | 15485.02  |
| M1                            |  | 3682.05   | 3825.13   | 3970.53   | 4119.21   | 4270.70   | 4424.92   | 4586.27   | 4750.37   |
| M2                            |  | 3511.01   | 3656.59   | 3805.34   | 3958.07   | 4113.45   | 4272.12   | 4436.89   | 4605.40   |
| M3                            |  | 3108.42   | 3223.91   | 3341.28   | 3461.00   | 3582.61   | 3707.02   | 3832.81   | 3961.42   |
| M4                            |  | 2526.72   | 2628.01   | 2730.74   | 2836.30   | 2943.26   | 3053.05   | 3170.52   | 3290.30   |
| M5                            |  | 2464.95   | 2561.47   | 2659.84   | 2760.13   | 2861.82   | 2965.89   | 3075.19   | 3186.87   |
| N1                            |  | 959.62    | 1009.63   | 1061.07   | 1113.97   | 1167.82   | 1223.10   | 1280.32   | 1338.98   |
| N2                            |  | 798.88    | 841.15    | 884.37    | 928.56    | 974.18    | 1020.29   | 1079.04   | 1138.70   |
| N3                            |  | 696.37    | 729.90    | 764.40    | 799.85    | 835.82    | 872.70    | 921.28    | 971.29    |
| N4                            |  | 445.02    | 476.14    | 508.73    | 541.80    | 576.31    | 611.79    | 647.79    | 685.19    |
| N5                            |  | 422.63    | 452.78    | 483.91    | 516.50    | 550.06    | 584.59    | 619.59    | 655.56    |
| Table 2: 10-Column Data Set B |  |           |           |           |           |           |           |           |           |
|                               |  | #9AC      | #0TH      | #1RA      | #2 U      | #3NP      | #4PU      | #5AM      | #6CM      |
| K                             |  | 106757.56 | 109649.50 | 112600.44 | 115606.37 | 135764.94 | 139247.50 | 142800.94 | 146427.00 |
| L1                            |  | 19786.08  | 20347.37  | 21044.54  | 21693.67  | 32120.78  | 32990.50  | 33478.73  | 34786.52  |
| L2                            |  | 19082.62  | 19693.28  | 20312.78  | 20947.75  | 31724.18  | 32584.88  | 33464.63  | 34362.98  |
| L3                            |  | 15910.33  | 16341.31  | 16770.61  | 17202.63  | 27795.72  | 28441.04  | 29095.02  | 29756.72  |
| M1                            |  | 4922.47   | 5097.84   | 5266.38   | 5442.44   | 10033.59  | 10292.92  | 10556.18  | 10822.88  |
| M2                            |  | 4775.71   | 4949.25   | 5125.52   | 5305.97   | 10255.00  | 10546.83  | 10844.38  | 11147.62  |
| M3                            |  | 4090.46   | 4221.81   | 4353.56   | 4488.61   | 9610.32   | 9863.98   | 10121.15  | 10381.79  |
| M4                            |  | 3409.56   | 3531.66   | 3648.91   | 3771.83   | 8497.41   | 8734.32   | 8975.23   | 9219.70   |
| M5                            |  | 3303.30   | 3422.08   | 3525.42   | 3639.29   | 8354.12   | 8583.14   | 8815.77   | 9051.43   |
| N1                            |  | 1401.02   | 1463.51   | 1518.76   | 1579.79   | 4128.31   | 4249.59   | 4372.23   | 4497.22   |
| N2                            |  | 1197.39   | 1257.54   | 1319.09   | 1382.10   | 3463.90   | 3581.64   | 3701.75   | 3823.70   |
| N3                            |  | 1019.35   | 1068.84   | 1115.41   | 1164.90   | 3368.24   | 3478.79   | 3591.75   | 3706.05   |
| N4                            |  | 724.57    | 764.89    | 795.99    | 832.90    | 2713.87   | 2812.66   | 2913.38   | 3016.44   |
| N5                            |  | 692.01    | 729.41    | 776.07    | 811.03    | 2695.05   | 2792.90   | 2892.18   | 2992.87   |



COUCHE K

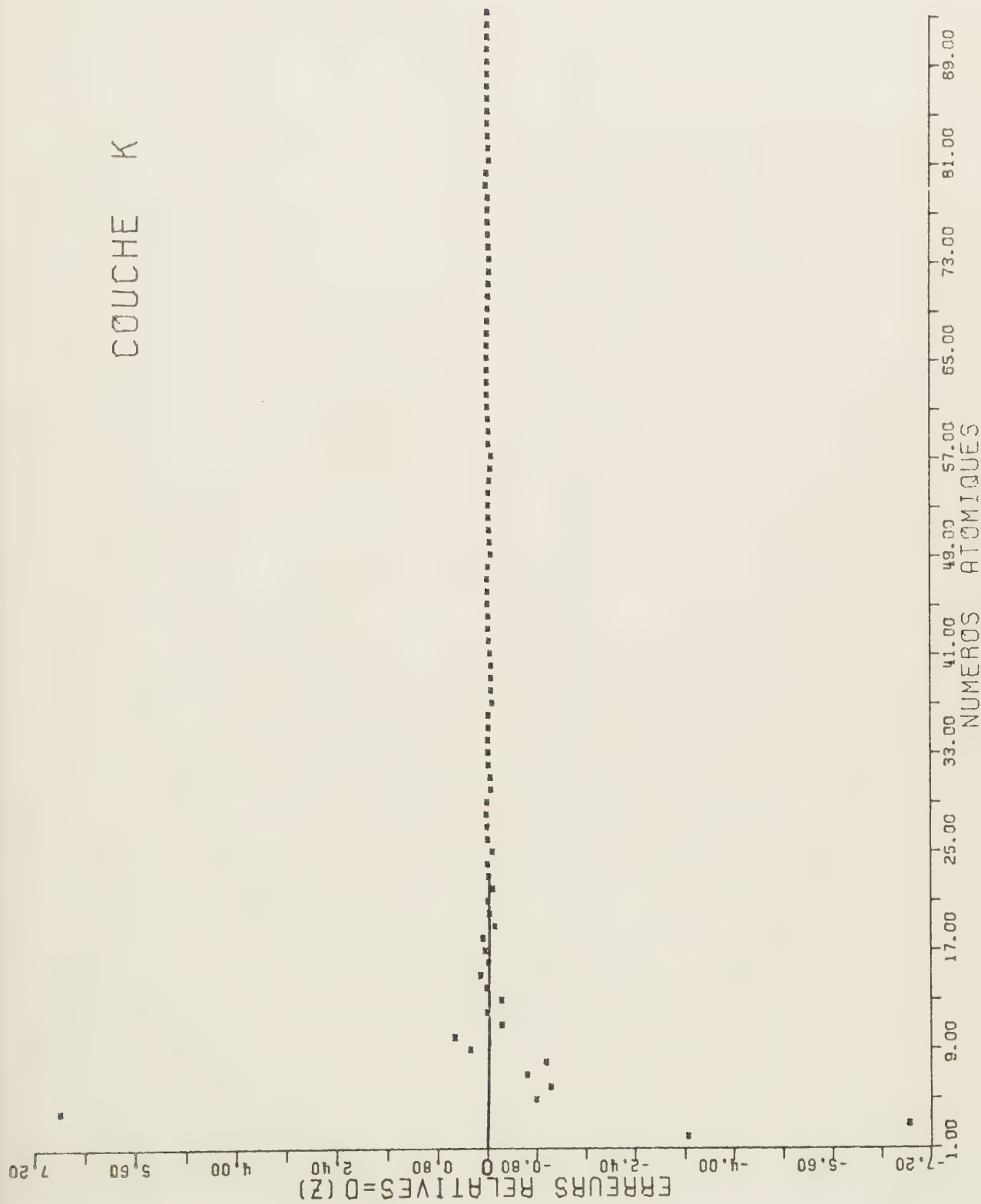


FIGURE : 9



# COUCHES M

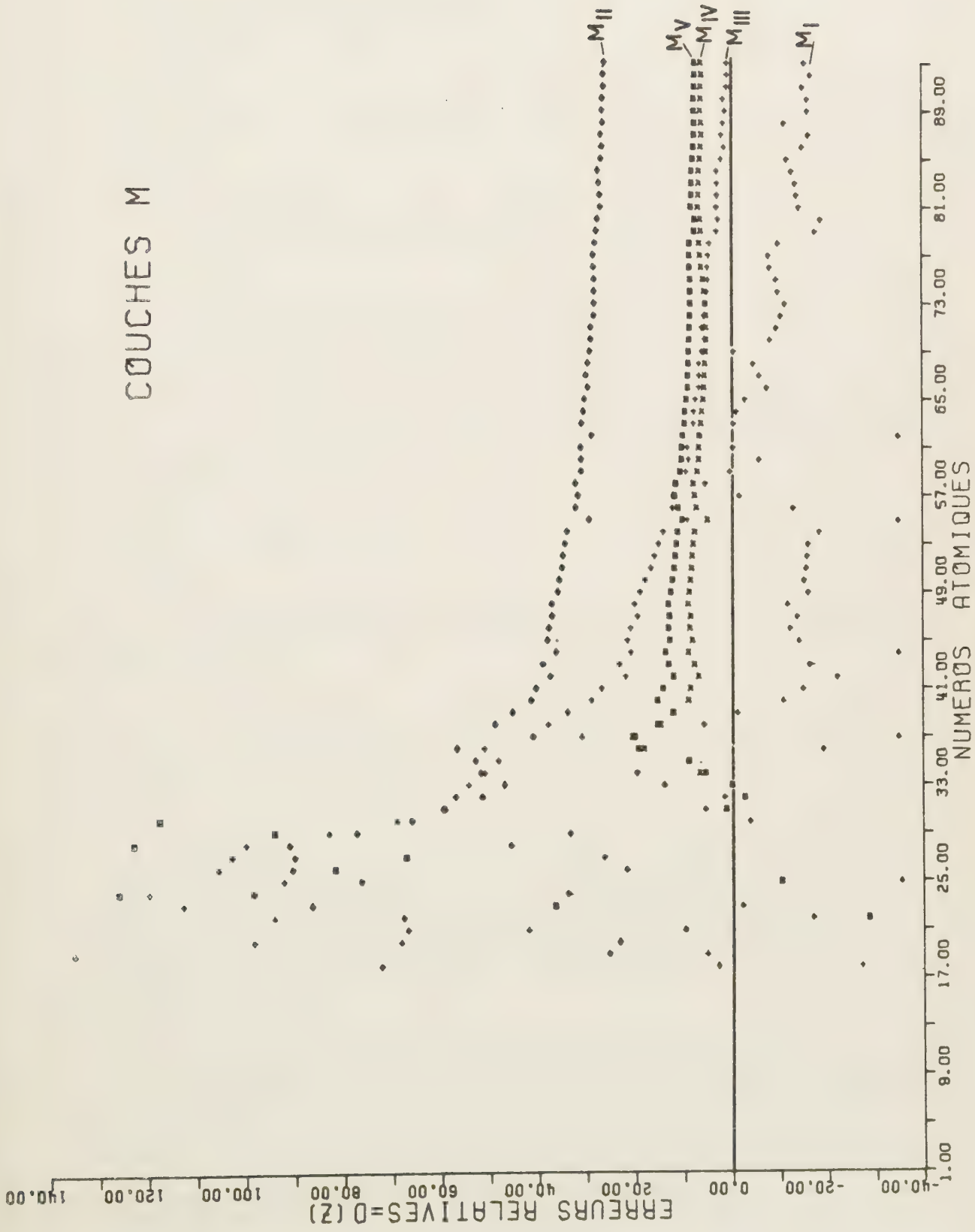


FIGURE 11



## CHAPITRE 1

### INTERACTION PHOTON-MATIERE

#### 1.- AFFAIBLISSEMENT D'UN FAISCEAU DE RAYONS X.

Le caractère global de l'affaiblissement d'un faisceau X, lors de la traversée d'une couche absorbante homogène d'épaisseur  $x$ , est décrit par la loi :

$$I(x) = I_0 e^{-\tau x} \quad (25)$$

où  $\tau$ , de dimension ( $L^{-1}$ ), est le coefficient linéaire d'absorption totale.

L'absorption des RX par la matière provient essentiellement de deux processus :

- Le premier est l'absorption vraie : une partie de l'énergie incidente disparaît pour se retrouver sous forme d'énergie potentielle (atome excité) ou cinétique (effet photoélectrique, effet AUGER) des constituants et sous forme d'énergie de rayonnement de fluorescence.

- Le second est la diffusion : les photons peuvent se disperser avec changement d'énergie (effet COMPTON) ou sans (effet THOMSON).

Le coefficient  $\tau$  est donc lié aux deux processus. Il se décompose comme suit :

$$\tau = \mu + \delta \quad (26)$$



où  $\mu$  et  $\delta$  représentent respectivement les coefficients d'absorption photoélectrique et de diffusion.

Si  $\rho$  est la masse spécifique du constituant, sans modifier la relation précédente, les coefficients massiques d'absorption sont :

$$\frac{\tau}{\rho} = \frac{\mu}{\rho} + \frac{\delta}{\rho}$$

Ils ne dépendent pas, en première approximation, de l'état physico-chimique mais du nombre d'atomes de l'élément absorbant. Ainsi, ils suivent la loi d'additivité :

$$\frac{\tau}{\rho} = \sum_{i=1} x_i \left(\frac{\tau}{\rho}\right)_i \quad (27)$$

$\left(\frac{\tau}{\rho}\right)_i$  et  $x_i$  (pourcentage massique) sont relatifs à chaque constituant  $i$ .

Nous sommes conduits à étudier l'absorption due à chaque atome afin de relier l'absorption observée  $\left(\frac{\tau}{\rho}\right)_i$  à la masse atomique  $A_i$  et au nombre d'Avogadro  $N$  par la relation :

$$\left(\frac{\tau}{\rho}\right)_i = \sigma^i \left(\frac{N}{A_i}\right) \quad (28)$$

$\sigma$ , coefficient atomique d'absorption est de dimension ( $L^2$ ). Cette grandeur peut s'interpréter comme si des atomes avaient une section efficace telle qu'ils absorbent tous les photons l'atteignant.

## 2.- ASPECT THEORIQUE

Nous nous intéressons aux photons de faible énergie.

L'expérience et le calcul [11] montrent que la diffusion est parfaitement négligeable devant l'absorption photoélectrique. Développer la théorie de la diffusion n'est donc guère utile, nous



n'envisagerons que certains aspects participant au phénomène global.

## 2.1.- La diffusion.

Celle de THOMSON représente l'interaction rayons X - électron, électron supposé libre. La collision est élastique. La section efficace est, en première approximation :

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \approx 6,57 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$$

$r_0$  : le rayon classique de l'électron.

Les atomes légers se rapprochent le plus de ce type d'interaction. Or, les expériences sur ces atomes sont généralement interprétées par la diffusion COMPTON.

L'effet COMPTON est essentiellement relativiste. Le transfert d'énergie et d'impulsion à l'électron se traduit par une augmentation de la longueur d'onde. La section efficace est donnée par KLEIN et NISHINA [12] :

$$\sigma_c = 2\pi r_0^2 \left\{ \frac{1+\alpha}{\alpha^2} \left[ \frac{2(1+\alpha)}{\alpha'} - \frac{1}{\alpha} \log \alpha' \right] + \frac{1}{2\alpha} \log \alpha' - \frac{1+3\alpha}{\alpha'^2} \right\}$$

où  $\alpha' = 1 + 2\alpha$  et  $\alpha = \frac{h\nu}{mc^2}$

Il en résulte que le coefficient massique d'absorption de diffusion est :

$$\frac{\delta}{\rho} = (\sigma_0 + \sigma_c) \frac{N}{A} \cdot Z$$

Selon le calcul, ce coefficient ne dépasse pas  $1 \text{ cm}^2/\text{g}$ . Le tableau ci-après donne les valeurs expérimentales en  $\text{cm}^2/\text{g}$  de  $(\tau/\rho)$  et  $(\mu/\rho)$  pour trois éléments légers, d'après BEARDEN [11].



|                       | Carbone (Z=6) |            | Azote (Z=7) |            | Oxygène (Z=8) |            |
|-----------------------|---------------|------------|-------------|------------|---------------|------------|
| $\lambda(\text{\AA})$ | $\tau/\rho$   | $\mu/\rho$ | $\tau/\rho$ | $\mu/\rho$ | $\tau/\rho$   | $\mu/\rho$ |
| 1,54                  | 4,33          | 3,98       | 7,31        | 6,88       | 11,82         | 11,37      |
| 1,84                  | 8,72          | 8,32       | 15,05       | 14,62      | 25,29         | 24,72      |
| 2,29                  | 15,19         | 14,74      | 25,15       | 24,59      | 41,03         | 40,27      |
| 2,75                  | 25,02         | 24,47      | 44,28       | 43,42      | 69,26         | 68,50      |
| 3,61                  | 60,67         | 60,17      | 99,75       | 98,89      | 156,59        | 155,45     |
| 4,17                  | 85,24         | 84,74      | 148,77      | 147,91     | 219,83        | 218,70     |
| 5,41                  | 170,48        | 170,48     | 319,90      | 319,90     | 417,82        | 417,82     |
| 7,96                  | 571,61        | 571,61     | 967,44      | 967,44     | 1377,70       | 1377,70    |
| 8,34                  | 666,87        | 666,87     | 1148,00     | 1148,00    | 1611,00       | 1611,00    |
| 12,24                 | 2025,69       | 666,87     | 3422,50     | 3422,50    | 4328,80       | 4328,80    |
| 13,59                 | 2542,15       | 2542,15    | 4514,70     | 4514,70    | 5458,00       | 5458,00    |
| 14,61                 | 3188,97       | 3188,97    | 5288,68     | 5288,68    | 0             | 0          |



Nous constatons que l'écart entre  $\frac{\tau}{\rho}$  et  $\frac{\mu}{\rho}$  diminue lorsque la longueur d'onde  $\lambda$  augmente. Ceci signifie que les phénomènes de diffusion COMPTON et THOMSON sont négligeables devant celui de l'absorption photo-électrique. Donc, l'affaiblissement des rayons X (25) de faible énergie peut s'expliquer par la photo-absorption et la relation (26) s'écrit :

$$\left(\frac{\tau}{\rho}\right) \neq \left(\frac{\mu}{\rho}\right)$$

## 2.2.- Photo-absorption.

L'électron de l'atome cible occupe initialement un état  $(n, l, j)$  dans le spectre discret  $E_{n|lj} = E_j$  (voir la 1ère partie).

Cet atome est ensuite bombardé par un faisceau de photons. L'électron est alors excité et passe soit à un état de continuum, soit à des états liés de l'atome inoccupés initialement. Le processus de désexcitation peut se produire de plusieurs manières : avec émission de rayonnement (phénomène de fluorescence X), avec émission d'un autre électron (effet AUGER).

Lorsque la longueur d'onde  $\lambda$  des photons incidents augmente progressivement, le coefficient  $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)$  (ou  $\frac{\tau}{\rho}$ ) croît rapidement puis décroît brusquement chaque fois que  $\lambda$  est égal à l'une des longueurs de discontinuité  $\lambda_j$  de l'atome. Cette discontinuité correspond à l'éjection d'un électron de la couche avec une énergie  $\frac{p^2}{2m}$  définie par la relation d'EINSTEIN :

$$h\nu = E_j + \frac{p^2}{2m} \quad (29)$$

Ceci correspond au processus :



$e$  représente l'électron de photoionisation ou électron AUGER.



L'électron libre ne peut absorber un photon. Par contre, plus les électrons sont liés, plus la probabilité de photoionisation est importante. Les électrons K et L sont donc particulièrement soumis à ce type d'interaction.

Intéressons nous au processus de l'électron K. La section efficace  $\sigma_K$  sera calculée suivant la théorie élémentaire de l'effet photoélectrique.

### 2.2.1.- Evaluation de la section efficace $\sigma_K$ .

Le système étudié est très simplifié .

Dans l'état initial, il contient un photon  $\hbar\omega$  et un électron K dans son état fondamental  $\psi_i(r)$ . Dans l'état final le photon disparaît et l'électron est dans un état  $\psi_f(r)$  délocalisé.

Il s'agit donc de calculer la probabilité d'éjection par seconde de cet électron dans l'angle solide  $d\Omega$  (direction  $K'$ ). Elle a pour expression [12] :

$$\begin{aligned} dp_{if} &= \frac{2\pi}{\hbar} \int L^3 \frac{D^3 k' d\Omega}{(2\pi)^3} |\langle \psi_f | H | \psi_i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - E_K - \frac{p^2}{2m}) \\ &= \frac{2\pi L^3}{\hbar} \int d\Omega \frac{m p}{(2\pi \hbar)^3} |H_{if}|^2 \end{aligned}$$

$p$  est évalué par la fonction  $\delta$  de DIRAC.  $E_K$  représente l'énergie de liaison de l'électron K et  $L^3$  le volume dans lequel le processus a lieu.  $H$  est l'hamiltonien de l'interaction photon-électron (11) :

$$H = \frac{e}{m} \vec{A} \cdot \vec{p}$$

Si le potentiel vecteur  $\vec{A}$  est normalisé à 1 photon dans le volume  $L^3$ ,  $H$  a pour expression :



$$H = \frac{e}{m} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega L} \right)^{1/2} \epsilon \cdot p e^{ikr} \times \sqrt{\mu_0 c^2}$$

où  $\epsilon$  est le vecteur unitaire de polarisation. Les éléments de la matrice sont :

$$H_{if} = \langle \psi_f | H | \psi_i \rangle = \frac{e}{m} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega L} \right)^{1/2} \langle \psi_f | \epsilon \cdot p e^{ikr} | \psi_i \rangle \quad (30)$$

Le calcul s'effectue à partir des deux hypothèses suivantes [13] .

1) L'énergie du photon incident  $\hbar\omega$  est très supérieure à celle d'ionisation  $E_K$  :

$$\frac{p^2}{2m} \gg E_K = \frac{m}{2} (\alpha Z)^2 \quad \text{or} \quad \xi = \frac{Ze^2}{\hbar\omega} \ll 1$$

L'approximation de BORN est valable. L'interaction nucléaire avec l'électron éjecté est négligeable : l'onde finale est plane.

2) L'étude se fait dans le domaine non relativiste :

$$\hbar\omega \ll mc^2$$

Il en résulte que les fonctions d'onde initiale et finale sont :

$$\begin{cases} \psi_i(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a} \\ \psi_f(r) = L^{-3/2} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \end{cases}$$

où  $a = \frac{a_0}{Z}$ , avec  $a_0$  première orbite de BOHR de l'atome d'hydrogène.



$$\langle \psi_f | \epsilon p e^{ikr} | \psi_i \rangle = (\pi a^3)^{-1/2} L^{-3/2} \int_{L^3} e^{-ik'r} \epsilon p e^{ikr} e^{-r/a} d^3r.$$

Comme  $p$ , impulsion de l'électron éjecté, est constante et en posant  $K = k - k'$  (le vecteur  $K$  est le moment de transfert de l'atome), le carré de l'expression précédente vaut :

$$(\pi a^3)^{-1} L^{-3} (\epsilon p)^2 \left| \int e^{ikr} e^{-r/a} d^3r \right|^2$$

Comme l'intégrale vaut  $(8\pi/a)/(K^2 + 1/a^2)^2$  pour  $a \ll L$ , ceci conduit à l'expression finale, avec  $p_\epsilon = \epsilon \cdot p$

$$dp_{if} = (16 p p_\epsilon^2 \mu_0 c^2 e^2 / 2\pi \hbar^3 \omega m L^3) \left[ \frac{a^3}{(1 + a^2 K^2)^4} \right] d\Omega$$

L'intensité du rayonnement incident est  $c/L^3$  quanta par centimètre carré et par seconde, il vient pour la section efficace différentielle :

$$d\sigma_K = \frac{dp_{if}}{c/L^3} = (16 p p_\epsilon^2 \mu_0 c e^2 / 2\pi \hbar^3 \omega m) \left[ \frac{a^3}{(1 + a^2 K^2)^4} \right] d\Omega$$

Si  $\theta$  est l'angle entre  $\vec{p}$  et  $\vec{K}$  et  $\phi$  l'angle entre  $\vec{A}$  et le plan  $(\vec{p}, \vec{K})$  :

$$\begin{cases} K^2 = k^2 + k'^2 - 2k k' \cos\theta \\ p_\epsilon = \epsilon \cdot p = p \sin\theta \cos\phi \end{cases}$$

La première hypothèse implique

$$\hbar\omega \neq \frac{1}{2} m v^2 ; k = \frac{\omega}{e} \neq \frac{mv^2}{2\hbar e} = q \frac{v}{2c}$$

Ce qui donne,  $k/k' = v/2c$ . Nous trouvons aussi  $ka = v/e \xi$  et  $qa = 2/\xi \gg 1$ . Ces équations conduisent à l'approximation suivante :



$$1 + (ka)^2 \neq (ak')^2 \left[ 1 - \beta \cos \theta \right] \quad \text{avec } \beta = \frac{v}{c}$$

et la section efficace différentielle devient :

$$d\sigma_K = (16 \mu_0 c e^2 a_0^2 / \pi Z^2 \hbar) \left( \frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^{7/2} \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \phi}{(1 - \beta \cos \theta)^4} d\Omega$$

ou bien :

$$d\sigma_K = \frac{64 r_0^2}{\alpha^3 Z^2} \left( \frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^{7/2} \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \phi}{(1 - \beta \cos \theta)^4} d\Omega$$

La deuxième hypothèse ( $\beta \neq 0$ ) permet de négliger  $\beta \cos \theta$  devant 1. Il est facile d'intégrer :

$$\sigma_K = 2 \times 32 \left( \frac{8\pi r_0^2}{\alpha^3 Z^2} \right) \frac{1}{3} \left( \frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^{7/2}$$

$$\boxed{\sigma_K = 2 \times 32 \frac{\sigma_0}{\alpha^3 Z^2} \left( \frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^{7/2}} \quad (31)$$

où  $\sigma_0$  est la section efficace de THOMSON.

Puisque la couche K contient 2 électrons, la section efficace totale a été multipliée par 2. Ainsi le coefficient d'absorption photoélectrique varie comme  $\left( \frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^{7/2}$  lorsqu'on est loin de la discontinuité d'absorption  $\lambda_K$ .

Si  $\lambda$  est voisine de  $\lambda_K$ , l'approximation de BORN n'est plus vérifiée : la fonction d'onde  $\psi_f$  n'est plus plane : FERMI et HALL [9] donnent l'approximation suivante :

$$\boxed{\sigma_K = \frac{6,31 \times 10^{-18}}{Z^2} \left( \frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^{8/3}} \quad (32)$$

### 2.2.2.- Effet AUGER.

L'électron éjecté peut être un électron AUGER.

L'énergie de transition du processus de désexcitation se transmet à un autre électron de la couche qui quitte l'atome.



L'atome, ayant initialement une lacune, en possède deux après l'effet AUGER: l'atome est ionisé deux fois.

La démarche théorique est semblable à celle de la photo-absorption (30). Cependant, le calcul se complique puisque l'électron éjecté n'était pas initialement dans l'état 1s.

Pour les faibles énergies de transition (éléments légers), ce processus est aussi important que celui de la photo-absorption. Par suite, il explique la chute considérable du rayonnement X émis.

Actuellement il est difficile de décrire le comportement de cet effet en l'absence de vérifications expérimentales.

### 2.2.3.- Difficultés théoriques.

Il existe essentiellement deux méthodes de calcul de la section efficace de photo absorption. Elles dérivent de modèles différents :

#### - Modèle de l'atome hydrogénoïde.

Le passage au cas de l'atome multi-électronique nécessite l'introduction de coefficients d'écran (voir la première partie). BEARDEN [11] a utilisé les résultats de COULSON et DUNCANSON [14]. Dans le cas des électrons 1s et 2s, il n'a pas pu retrouver les valeurs expérimentales.

Ce modèle ne donne des valeurs relativement correctes que dans certains domaines d'énergies incidentes [8] [10]. Ce type de calcul semble donc inadéquat surtout aux très grandes longueurs d'ondes et la précision du calcul dépend de l'exactitude des fonctions d'onde utilisées [15].



- Modèle des électrons indépendants

De nombreux auteurs [15], [16], [37] ont cherché une procédure pour obtenir de meilleurs fonctions d'onde de l'électron  $(n, l)$  à partir de la méthode HARTREE-FOCK. J.W. COOPER [15] détermine le potentiel central pour  $r$  tendant vers 0 et l'infini, il en déduit les fonctions d'onde cherchées. Par contre, M.C. GUIRE [16] a procédé de façon inverse.

Les valeurs calculées correspondent assez bien aux résultats expérimentaux dans le cas des gaz rares. Des difficultés apparaissent pour les autres éléments [17].



## CHAPITRE 2

### COEFFICIENTS D'ABSORPTION

Etant donné le caractère approximatif et restrictif de la théorie pour l'absorption photoélectrique, elle ne présente qu'un aspect semi-quantitatif. C'est ainsi que de nombreuses formules empiriques ou semi-empiriques sont souvent rencontrées dans la détermination des coefficients d'absorption.

#### 1.- RAPPELS

De nombreux auteurs ont utilisé la relation analytique suggéré par LEROUX [18] .

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right) = C \lambda^{n_0} \quad (33)$$

l'exposant  $n_0$  caractérise les différents domaines de longueurs d'ondes étudiés et la constante  $C$  ne dépend que du numéro atomique  $Z$  de l'absorbant.

Les coefficients  $C$  et  $n_0$  de certains éléments ont été obtenus, par approche des résultats expérimentaux, par HEINRICH [19] et FRAZER [20]. Ils montrent que  $n_0$  dépend de  $Z$ . HEINRICH détermine graphiquement le coefficient  $C$  et en déduit la valeur de  $n_0$ . Plus généralement, FRAZER exprime  $n_0$  et  $C$  sous une forme polynomiale en  $Z$  dont les coefficients sont calculés par une méthode de moindres carrés.

D'autres méthodes sont basées sur une utilisation de formules théoriques approchées dans lesquelles certains coefficients sont ajustés empiriquement.



VICTORIEN [21] a tabulé des coefficients d'absorption pour les courtes longueurs d'onde (inférieures à  $8 \text{ \AA}$ ). HENKE [17] a cherché une "fonction universelle" permettant de calculer les coefficients d'absorption des éléments plus légers que le gallium ( $Z = 31$ ) entre  $8.3 \text{ \AA}$  et  $44 \text{ \AA}$ . BEARDEN [11] a lié directement ce coefficient à la section efficace d'interaction photon-atome selon la théorie de STOBBE.

## 2.- PROPOSITION POUR UNE DETERMINATION DES COEFFICIENTS D'ABSORPTION.

Ces études ont pris un essor nouveau depuis que les expérimentateurs ont réussi à mesurer les coefficients d'absorption des éléments très légers dans le domaine des très faibles énergies. Les tables de HEINRICH et la formule de FRAZER deviennent inutilisables dans ce domaine (fig. 12).

En raison de la complexité de la théorie de l'absorption, il est plus aisé d'établir une formule semi-empirique donnant des coefficients d'absorption du type HEITLER et FERMI. Cette formule permet de compléter les tables de HEINRICH et FRAZER et est généralisable, tant dans le domaine des rayons X durs que dans celui des rayons X très mous.

### 2.1.- Choix de la fonction.

D'après les relations (31) et (32) la section efficace de photo-absorption peut s'écrire sous forme simplifiée :

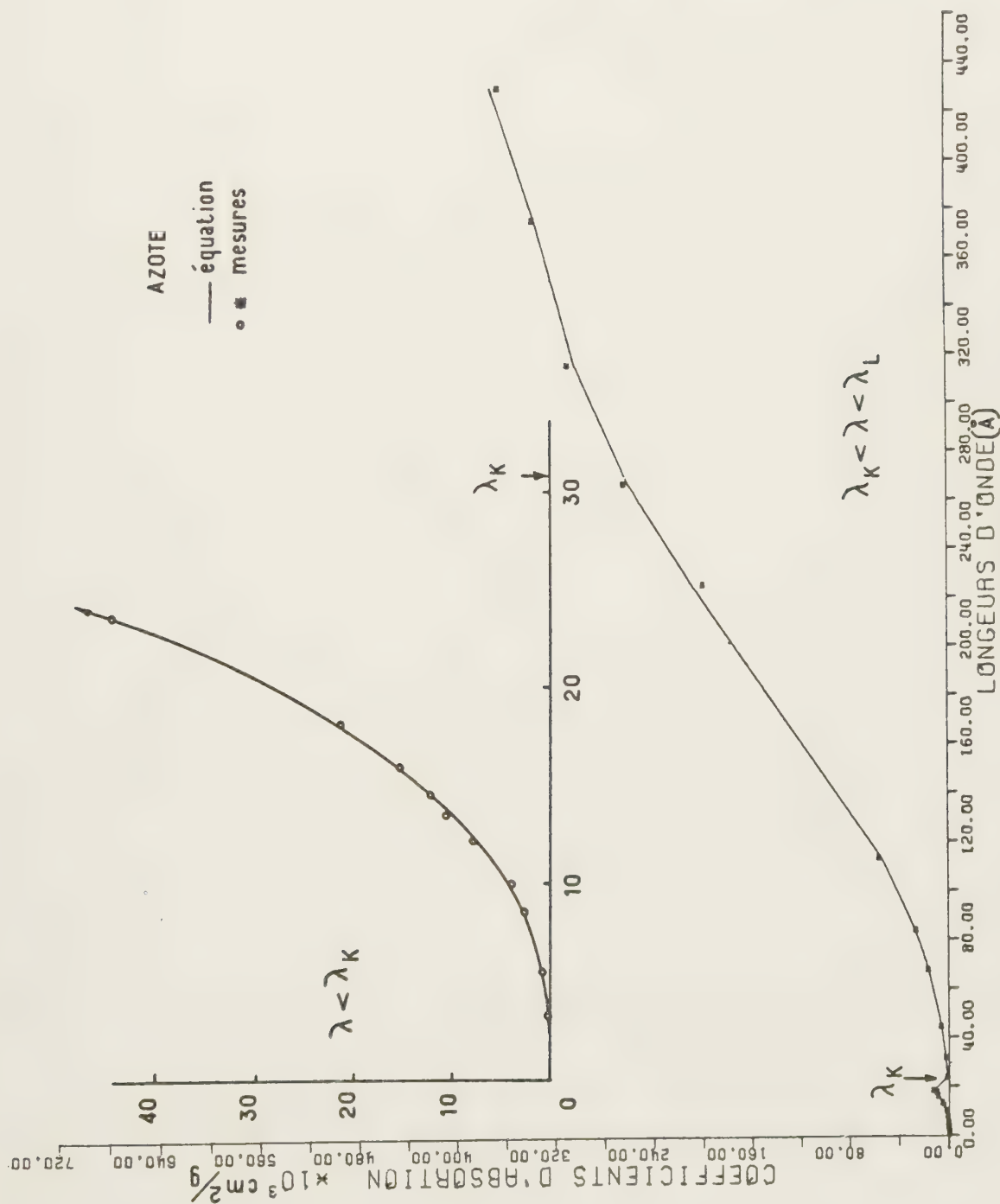
$$\sigma_K = B \left( \frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^n \quad \text{si} \quad \lambda < \lambda_K$$

Pour le coefficient d'absorption, l'expression (28) conduit à :

$$\left( \frac{\mu}{\rho} \right)_K = C' \left( \frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^n \quad (34)$$

$C'$  représente une constante ; l'exposant  $n$  varie avec la longueur d'onde incidente de sorte que :







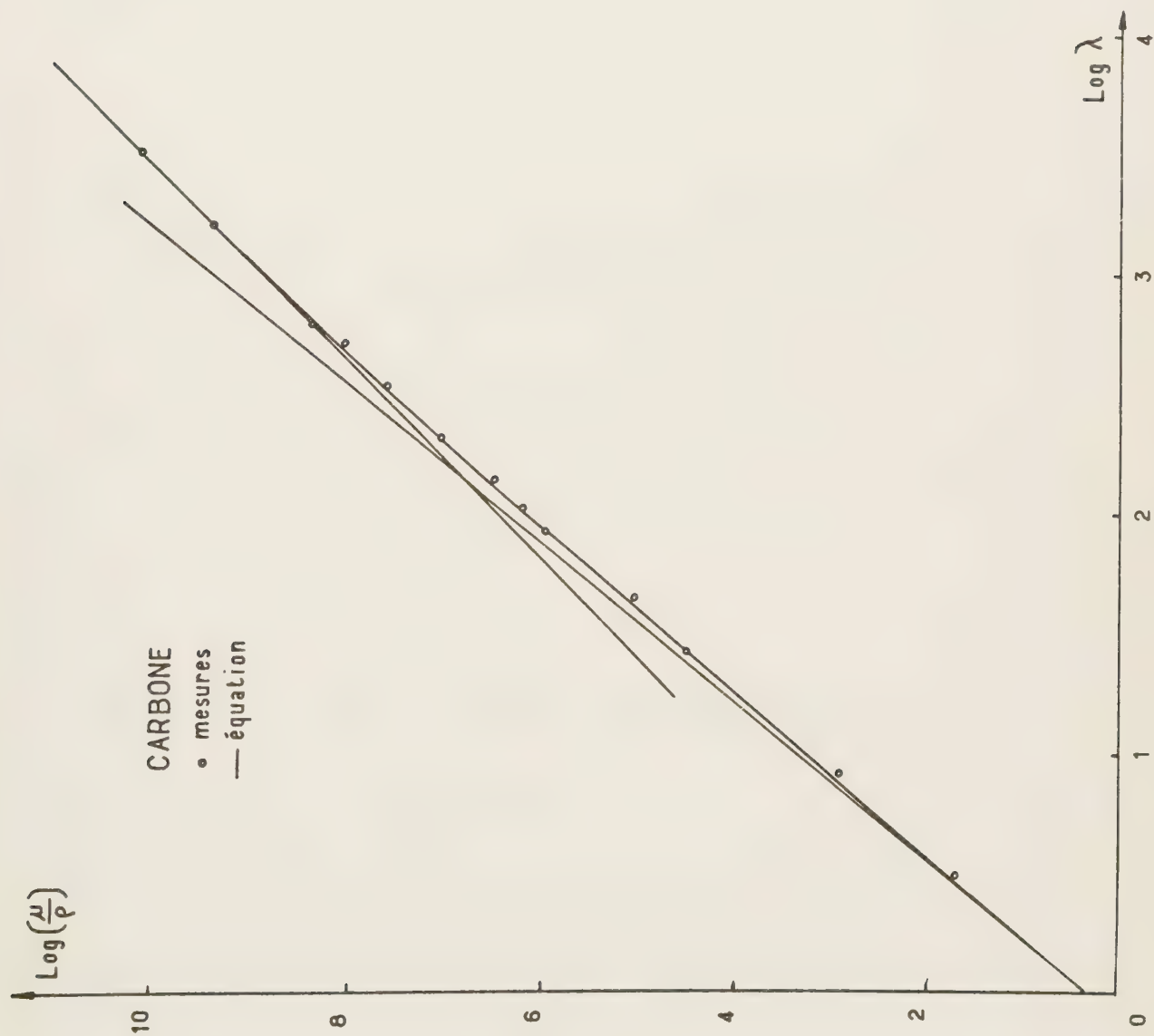


FIGURE 12 b



$$\begin{cases} n \neq 7/2 & \text{pour } \frac{\lambda}{\lambda_K} \ll 1 \\ n \neq 8/3 & \text{pour } \frac{\lambda}{\lambda_K} \neq 1 \end{cases}$$

Nous choisissons pour représenter  $n$  une forme polynomiale en  $(\lambda/\lambda_K)$  :

$$n^k = \sum_{p=0}^q n_p \left(\frac{\lambda}{\lambda_K}\right)^p$$

Pour que l'expression (34) reste identique entre les discontinuités d'absorption  $K, L_I, L_{II}, \dots$  celles ci sont indexées par  $i = 1, 2, 3, \dots$  et par  $\Lambda_i = \lambda/\lambda_i$ . Pour un atome  $Z$ , nous avons :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i &= C_i' \Lambda_i^{n_i} \\ n^i &= \sum_{p=0}^q n_p \Lambda_i^p \end{aligned} \quad (35)$$

Posons  $C_i = C_i' / \lambda_i^{n_0}$ , l'expression précédente devient :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i &= C_i \lambda^{n_0} \Lambda_i^{(n^i - n_0)} \\ \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i &= \left(\frac{\mu}{\rho}\right) \cdot \left(\frac{\lambda}{\lambda_i}\right)^{(n^i - n_0)} \quad \text{où } \left(\frac{\mu}{\rho}\right) = C_i \lambda^{n_0} \end{aligned}$$

Il est intéressant d'étudier les valeurs limites des relations (35).

## 2.2.- Définition des régions limites.

Deux cas sont à envisager :



- La région I où  $\Lambda_i \ll 1$  ( $\lambda \ll \lambda_i$ ). La longueur d'onde incidente est très différente de la discontinuité  $\lambda_i$ . L'exposant  $n^i$  est proche de  $n_0$  :

$$n^i \approx n_0$$

$$\text{et} \quad \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \approx \left(\frac{\mu}{\rho}\right) = C_i \lambda^{n_0} \quad (36)$$

Dans ce cas particulier, nous retrouvons bien la relation de LEROUX [18] .

L'utilisation de cette formule est donc restreinte, ce qui limite le domaine d'étude de plusieurs auteurs.

- La région II où  $\Lambda_i \neq 1$  ( $\lambda \neq \lambda_i$ ). Nous nous intéressons cette fois au phénomène d'absorption au voisinage de la discontinuité  $\lambda_i$ .

La relation (35) s'écrit :

$$\text{Log} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i = \text{Log} \left(\frac{\mu}{\rho}\right) + n_i \text{Log} \Lambda_i$$

$$\text{Log} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i = \text{Log} C'_i + n_i \text{Log} \Lambda_i \quad \text{avec} \quad \text{Log} C' = \text{Log} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)$$

Quand  $\Lambda_i$  tend vers 1, nous avons :

$$\text{Log} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \rightarrow \text{Log} C'_i$$

ou bien :

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \rightarrow C'_i$$

$C'_i$  est donc le coefficient relatif à la discontinuité d'absorption ( $\lambda = \lambda_i$ ), et l'exposant  $n^i$  tend vers  $n_t$  qui est la somme des  $n_q$  :

$$n^i \rightarrow n_t = \sum_{p=0}^q n_p \quad (37)$$

$$\Lambda_i \rightarrow 1$$



En conclusion, les exposants limites  $n_0$  et  $n_t$  permettent d'apprécier la validité de l'approximation dans la théorie élémentaire de la photo-absorption. Les valeurs  $n_0$  et  $n_t$  seront par la suite objets de notre étude.



### CHAPITRE 3

#### VALIDITE DE LA FONCTION

Tout récemment, plusieurs auteurs [23] à [33] ont fourni des valeurs des coefficients d'absorption dans le domaine des rayons X très mous. La préparation des échantillons joue fortement sur la précision des mesures. Ces données expérimentales constituent la base de la détermination de notre fonction.

La constante et l'exposant de cette fonction sont évalués par le programme utilisé dans la première partie : des tests d'ajustement attribuent un degré d'information à chacun des  $n_q$  et permettent ainsi de choisir la forme analytique optimale de la fonction. La plus grande valeur de  $q$  vaut 4. Le signe de  $n_q$  dépend de la parité de  $q$  :

$$n_q > 0 \text{ si } q \text{ est pair}$$

$$n_q < 0 \text{ si } q \text{ est impair}$$

#### 1.- RESULTATS.

Dans les tableaux 4, 5, 6, 7 sont reportées les valeurs de  $C$  et de  $n$  pour des longueurs d'onde incidentes telles que  $\lambda < \lambda_K$ ;  $\lambda_K < \lambda < \lambda_{L_I}$ ;  $\lambda_{L_{III}} < \lambda < \lambda_{M_I}$  et  $\lambda_{M_V} < \lambda < \lambda_{N_I}$ . Nous y trouvons dans les colonnes successivement : les absorbants, le logarithme népérien de la constante  $C'$ , la constante  $C$ , les exposants  $n_q$  ( $q = 0, 1, 2, 3, 4$ ) ;  $n_t$  et l'énergie du niveau  $i$  sont :



| Z       | Log $c_1^i$ | $c_1$  | $n_0$ | $-n_1$ | $n_2$ | $-n_3$ | $n_4$ | $n_t$ | $\lambda_K(\text{\AA})$ |
|---------|-------------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|-------|-------------------------|
| 1 H     | 8,207       | 0,263  | 1,4   | 16,71  |       |        |       | 15,31 | 911,737                 |
| 2 He    | 15,044      | 0,023  | 3,02  | 2,59   | 10,33 | 9,04   |       | 1,715 | 504,246                 |
| 3 Li    | 13,233      | 0,098  | 2,87  | 3,71   | 11,51 | 18,97  | 12,74 | 4,44  | 226,444                 |
| 4 Be    | 12,101      | 0,250  | 2,86  | 3,06   | 7,42  | 10,33  | 5,49  | 2,38  | 111,692                 |
| 5 B     | 11,443      | 0,609  | 2,85  | 1,66   | 1,47  |        |       | 2,66  | 65,946                  |
| 6 C     | 10,950      | 1,172  | 2,85  | 1,31   | 1,11  |        |       | 2,65  | 43,685                  |
| 7 N     | 10,417      | 1,869  | 2,85  | 1,19   | 0,90  |        |       | 2,56  | 30,871                  |
| 8 O     | 10,027      | 3,069  | 2,83  | 0,91   | 0,58  |        |       | 2,5   | 23,304                  |
| 9 F     | 9,607       | 4,118  | 2,83  | 0,83   | 0,54  |        |       | 2,54  | 18,088                  |
| 10 Ne   | 9,304       | 6,224  | 2,81  | 0,62   | 0,33  |        |       | 2,52  | 14,301                  |
| 11 Na   | 8,957       | 8,609  | 2,81  | 0,55   | 0,29  |        |       | 2,55  | 11,564                  |
| 12 Mg   | 8,697       | 10,689 | 2,81  | 0,51   | 0,29  |        |       | 2,59  | 9,500                   |
| 13 Al   | 8,412       | 13,564 | 2,80  | 0,41   | 0,23  |        |       | 2,62  | 7,949                   |
| 14 Si   | 8,185       | 17,556 | 2,78  | 0,30   |       |        |       | 2,48  | 6,742                   |
| 15 P    | 7,933       | 21,590 | 2,77  | 0,21   |       |        |       | 2,56  | 5,779                   |
| 16 S    | 7,759       | 28,100 | 2,74  | 0,10   |       |        |       | 2,64  | 5,015                   |
| 17 Cl   | 7,531       | 32,805 | 2,73  |        |       |        |       | 2,73  | 4,393                   |
| 18 Ar   | 7,336       | 38,126 | 2,73  |        |       |        |       | 2,73  | 3,871                   |
| * 19 K  | 7,126       | 43,850 | 2,71  |        |       |        |       | 2,71  | 3,437                   |
| * 20 Ca | 6,952       | 50,600 | 2,70  |        |       |        |       | 2,70  | 3,070                   |
| * 21 Sc | 6,799       | 58,507 | 2,69  |        |       |        |       | 2,69  | 2,759                   |
| 22 Ti   | 6,617       | 64,433 | 2,68  |        |       |        |       | 2,68  | 2,496                   |

TABLEAU (4)

Valeurs  $c_1$  et  $n_p$  de  $\left(\frac{\nu}{\rho}\right)_1 = c_1^i \Lambda_1^{n_1}$  ( $\Lambda_1 = \lambda / \lambda_K$ )

(\*) valeurs interpolées

- pour  $\lambda < \lambda_K$  -



| Z     | Log $c_2^1$ | $c_2$  | $n_0$ | $-n_1$ | $n_2$ | $-n_3$ | $n_4$ | $n_t$ | $\lambda_{L_I}(\text{\AA})$ |
|-------|-------------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|-------|-----------------------------|
| 6 C   | 15,970      | 0,292  | 2,37  |        |       |        |       | 2,37  | 1418,512                    |
| 7 N   | 15,561      | 0,332  | 2,48  |        | 4,29  |        |       | 6,77  | 828,176                     |
| 8 O   | 13,347      | 1,475  | 2,07  | 2,20   |       |        | 5,21  | 5,08  | 523,114                     |
| 9 F   | 15,289      | 0,305  | 2,75  |        | 7,18  |        |       | 9,93  | 399,929                     |
| 10 Ne | 12,293      | 1,549  | 2,11  | 3,10   | 6,89  | 23,82  | 19,47 | 1,55  | 275,506                     |
| 11 Na | 12,197      | 0,860  | 2,34  | 4,52   | 7,34  | 7,99   | 3,52  | 0,69  | 195,858                     |
| 12 Mg | 11,917      | 1,138  | 2,39  | 3,46   | 3,57  | 1,96   |       | 4,46  | 138,678                     |
| 13 Al | 11,679      | 1,436  | 2,43  | 2,56   | 1,36  |        |       | 1,23  | 105,334                     |
| 14 Si | 11,492      | 1,762  | 2,47  | 2,26   | 1,05  |        |       | 1,26  | 83,375                      |
| 15 P  | 11,218      | 2,057  | 2,51  | 1,89   | 0,71  |        |       | 1,33  | 65,493                      |
| 16 S  | 11,080      | 2,674  | 2,53  | 1,45   |       |        |       | 1,08  | 54,092                      |
| 17 Cl | 10,852      | 3,354  | 2,52  | 1,24   |       |        |       | 1,28  | 45,884                      |
| 18 A  | 10,655      | 3,780  | 2,55  | 1,02   |       |        |       | 1,53  | 38,743                      |
| 19 K  | 10,567      | 5,843  | 2,52  | 0,57   |       |        |       | 1,95  | 32,877                      |
| 20 Ca | 10,378      | 6,814  | 2,53  | 0,54   |       |        |       | 1,99  | 28,318                      |
| 21 Sc | 10,175      | 7,303  | 2,55  | 0,44   |       |        |       | 2,11  | 24,791                      |
| 22 Ti | 10,000      | 8,320  | 2,55  | 0,38   |       |        |       | 2,17  | 21,993                      |
| 23 V  | 9,837       | 10,498 | 2,51  | 0,31   |       |        |       | 2,20  | 19,735                      |
| 24 Cr | 9,775       | 16,937 | 2,41  |        |       |        |       | 2,41  | 17,849                      |
| 25 Mn | 9,604       | 18,242 | 2,41  |        |       |        |       | 2,40  | 16,122                      |
| 26 Fe | 9,506       | 21,388 | 2,40  |        |       |        |       | 2,40  | 14,653                      |
| 27 Co | 9,303       | 21,105 | 2,41  |        |       |        |       | 2,41  | 13,394                      |

TABLEAU (5)  
Valeurs  $c_2$  et  $n_p$  de  $(\frac{\mu}{\rho})_2 = c_2^1 \Lambda_2^{n_2^2}$  ( $\Lambda_2 = \lambda/\lambda_{L_I}$ )  
- pour  $\lambda_K < \lambda < \lambda_{L_I}$  -



| Z     | Log $c_5'$ | $c_5$  | $n_0$ | $-n_1$ | $n_2$ | $-n_3$ | $n_4$ | $n_t$ | $\lambda_{M_I} (\text{\AA})$ |
|-------|------------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|-------|------------------------------|
| 25 Mn | 11,299     | 8,223  | 1,84  | 0,79   |       |        | 3,66  | 4,71  | 147,769                      |
| 26 Fe | 10,970     | 6,163  | 1,87  | 2,06   | 1,43  |        |       | 1,24  | 133,453                      |
| 27 Co | 10,878     | 4,897  | 1,93  | 2,73   | 3,15  | 1,99   |       | 0,36  | 123,116                      |
| 28 Ni | 10,972     | 5,452  | 1,97  | 2,35   | 2,18  | 0,90   |       | 0,9   | 110,893                      |
| 29 Cu | 11,054     | 5,183  | 2,03  | 2,11   | 1,58  |        |       | 1,5   | 103,487                      |
| 30 Zn | 10,958     | 5,029  | 2,07  | 2,11   | 1,29  |        |       | 1,25  | 91,227                       |
| 31 Ga | 10,825     | 4,842  | 2,12  | 1,95   | 1,06  |        |       | 1,23  | 78,417                       |
| 32 Go | 10,739     | 4,939  | 2,16  | 1,78   | 0,87  |        |       | 1,25  | 68,877                       |
| 33 As | 10,627     | 6,784  | 2,12  | 1,26   |       |        |       | 0,86  | 60,923                       |
| 34 Se | 10,519     | 6,559  | 2,17  | 1,20   |       |        |       | 1,97  | 53,554                       |
| 35 Br | 10,436     | 6,969  | 2,21  | 1,03   |       |        |       | 1,18  | 46,696                       |
| 36 Kr | 10,350     | 6,838  | 2,25  | 1,07   |       |        |       | 1,18  | 42,195                       |
| 37 Rb | 10,291     | 7,698  | 2,26  | 0,92   |       |        |       | 1,34  | 38,491                       |
| 38 Sr | 10,194     | 9,163  | 2,25  | 0,82   |       |        |       | 1,43  | 34,679                       |
| 39 Y  | 10,129     | 9,287  | 2,29  | 0,73   |       |        |       | 1,56  | 31,498                       |
| 40 Zr | 10,041     | 10,086 | 2,30  | 0,68   |       |        |       | 1,72  | 28,812                       |
| 41 Nb | 9,992      | 10,581 | 2,33  | 0,63   |       |        |       | 1,70  | 26,468                       |
| 42 Mo | 9,961      | 21,708 | 2,33  | 0,55   |       |        |       | 1,78  | 24,570                       |
| 43 Te | 9,754      | 12,243 | 2,34  | 0,51   |       |        |       | 1,83  | 22,151*                      |
| 44 Ru | 9,755      | 13,182 | 2,35  | 0,51   |       |        |       | 1,84  | 21,193                       |
| 45 Rh | 9,695      | 25,773 | 2,37  | 0,47   |       |        |       | 1,90  | 19,770                       |
| 46 Pd | 9,625      | 27,760 | 2,42  | 0,55   |       |        |       | 1,87  | 18,507                       |
| 47 Ag | 9,910      | 13,671 | 2,56  |        |       |        |       | 2,56  | 17,279                       |

TABLEAU (6)

Valeurs  $c_5$  et  $n_p$  de  $(\frac{\mu}{\rho})_5^n = c_5' \Lambda_5^n$  ( $\Lambda_5 = \lambda/\lambda_{M_I}$ )

(\*) valeurs interpolées

- pour  $\lambda_{L_{III}} < \lambda < \lambda_{M_I}$  -



| Z     | Log $c'_{10}$ | $c_{10}$ | $n_0$ | $-n_1$ | $n_2$ | $-n_3$ | $n_4$ | $n_t$  | $\lambda_{N_I} (\text{\AA})$ |
|-------|---------------|----------|-------|--------|-------|--------|-------|--------|------------------------------|
| 49 In | 8,669         | 218,618  | 0,71  |        | 7,81  | -9,45  | -2,04 | -18,59 | 101,705                      |
| 50 Sn | 8,644         | 24,244   | 1,21  | 3,21   |       | -2,05  | -0,89 | - 4,94 | 90,826                       |
| 51 Sb | 8,598         | 8,775    | 1,46  | 4,12   |       | -6,13  | -5,95 | - 7,78 | 81,564                       |
| 52 Te | 8,769         | 17,790   | 1,37  | 2,93   | 0,84  |        |       | - 0,72 | 73,665                       |
| 53 I  | 8,878         | 14,996   | 1,47  | 2,62   |       | -1,01  |       | - 2,16 | 66,512                       |
| 54 Xe | 8,900         | 22,420   | 1,42  | 2,02   |       |        |       | - 0,6  | 58,997*                      |
| 55 Cs | 8,935         | 12,443   | 1,61  | 2,38   | 0,49  |        |       | - 0,88 | 53,717                       |
| 56 Ba | 8,993         | 12,104   | 1,67  | 2,04   | 0,72  |        |       | 0,35   | 49,003                       |
| 57 La | 9,130         | 137,288  | 1,10  |        |       |        |       | 1,10   | 45,850                       |
| 58 Ce | 9,215         | 9,630    | 1,85  | 1,73   |       | 1,24   |       | 1,36   | 42,810                       |
| 59 Pr | 9,173         | 13,630   | 1,77  | 1,45   |       | 0,50   |       | 0,82   | 40,715                       |
| 60 Nd | 9,147         | 16,963   | 1,72  | 1,23   |       |        |       | 0,49   | 39,333                       |
| 61 Pm | 9,260         | 10,979   | 1,88  | 1,69   | 0,83  |        |       | 1,02   | 38,515*                      |
| 62 Sm | 9,265         | 13,665   | 1,83  | 1,02   |       |        | 0,41  | 1,22   | 37,863                       |
| 63 Eu | 9,248         | 7,882    | 2,03  | 2,06   | 1,57  |        | -0,71 | 0,83   | 34,419                       |
| 64 Gd | 9,203         | 19,006   | 1,79  | 0,85   |       |        |       | 0,94   | 32,990                       |
| 65 Tb | 9,210         | 33,153   | 1,66  |        | 1,06  |        |       | 2,72   | 31,158                       |
| 66 Ps | 9,283         | 10,232   | 2,05  | 1,37   | 0,73  |        | -0,22 | 1,19   | 29,781                       |
| 67 Ho | 9,286         | 7,291    | 2,18  | 1,92   | 1,92  | 0,94   |       | 1,24   | 28,455                       |
| 68 Er | 9,383         | 36,952   | 1,74  |        |       |        |       | 1,74   | 27,606                       |
| 68 Tm | 9,319         | 11,637   | 2,10  | 1,03   | 0,32  |        |       | 1,39   | 26,283                       |
| 70 Yb | 9,673         | 11,279   | 2,24  | 0,11   |       |        |       | 2,13   | 25,447                       |
| 71 Lu | 9,290         | 15,385   | 2,05  | 0,67   |       | 0,29   | 0,34  | 1,43   | 24,492                       |
| 72 Hf | 9,303         | 35,228   | 1,83  |        |       |        |       | 1,83   | 23,040                       |

TABLEAU (7)  
Valeurs  $c_{10}$  et  $n_p$  de  $(\frac{\mu}{\rho})_{10} = c'_{10} \Lambda_{10}^{n_{10}}$  ( $\Lambda_{10} = \lambda/\lambda_{N_I}$ )

(\*) valeurs interpolées

- pour  $\lambda_{M_V} < \lambda < \lambda_{N_I}$  -



$$E \text{ (eV)} \times \lambda_i \text{ (\AA)} = 12.378$$

Ces tableaux permettent de déterminer les coefficients d'absorption d'un élément Z. Le calcul s'effectue à l'aide de la relation (35) ; les paramètres utiles se trouvent sur la ligne Z correspondante du tableau.

## 2.- DISCUSSION

La théorie ne traite que la photo-absorption de l'électron K. Notre interprétation se limitera donc aux coefficients d'absorption de cet électron. Pour les autres électrons, l'interprétation sera gênée par le fait que les données sont rarement complètes et précises.

### 2.1.- Constante $C_K$ et exposant $n_K$ .

Les valeurs de  $C_K$  et de  $n_K$  des auteurs cités sont dispersées, les différences proviennent des trois causes suivantes :

- Le choix des données expérimentales
- La fonction utilisée : nous pouvons aussi bien choisir une fonction polynomiale en  $\log \lambda$  du type FRAZER bien qu'elle ne présente aucun sens phénoménologique.
- Enfin, l'adoption de la méthode d'optimisation détermine la précision du calcul.

Les figures (13) et (14) donnent les variations de  $n_K (Z)$  et  $C_K (Z)$  en fonction du numéro atomique Z. Nous avons porté les valeurs obtenues par HEINRICH, FRAZER et nous même.

Nos valeurs de  $n_K$  diffèrent plus de celles de FRAZER que de celles de HEINRICH. Il est plus intéressant de comparer nos valeurs à celle de HEINRICH puisque les deux types de calcul sont semblables.



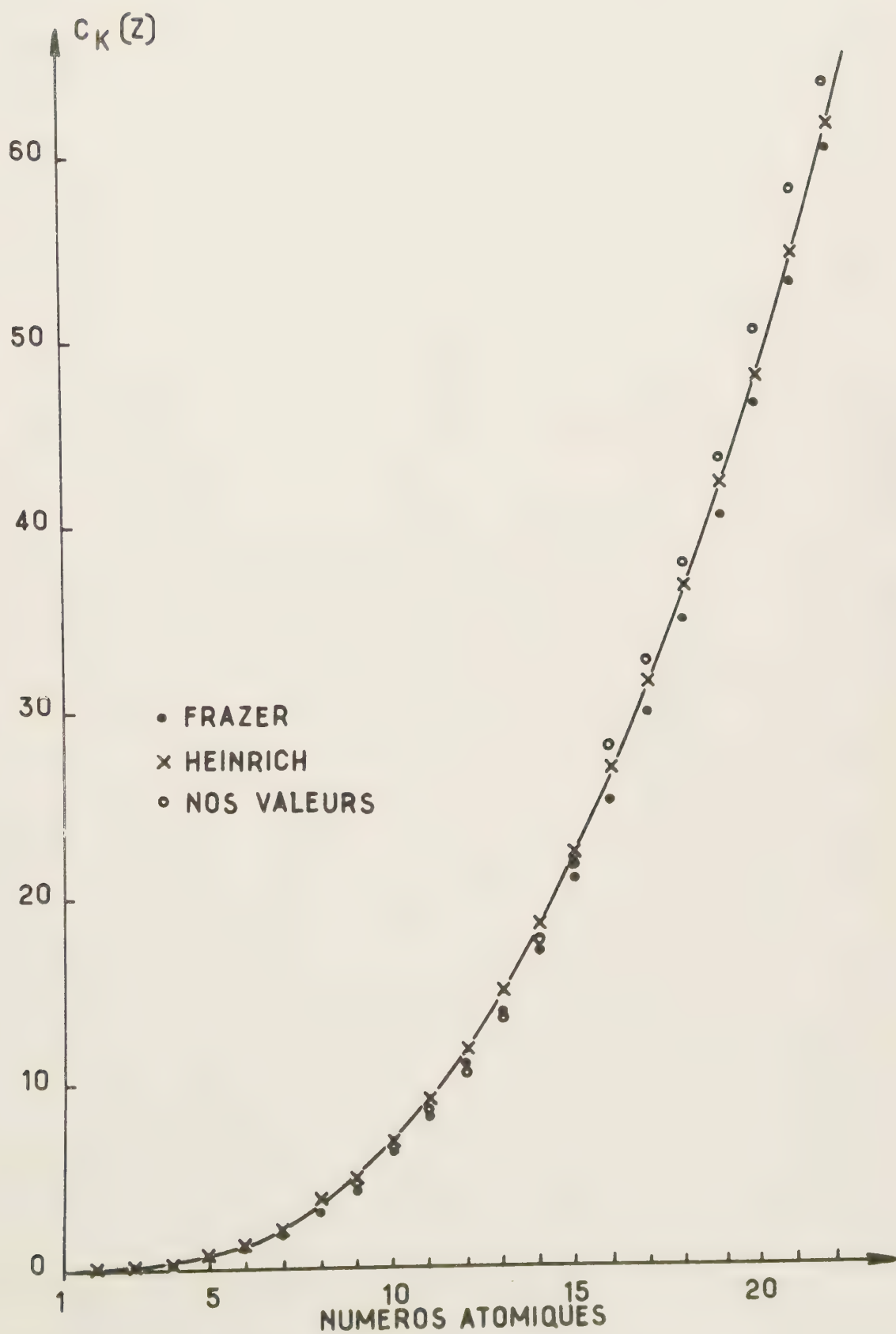


FIGURE : 13



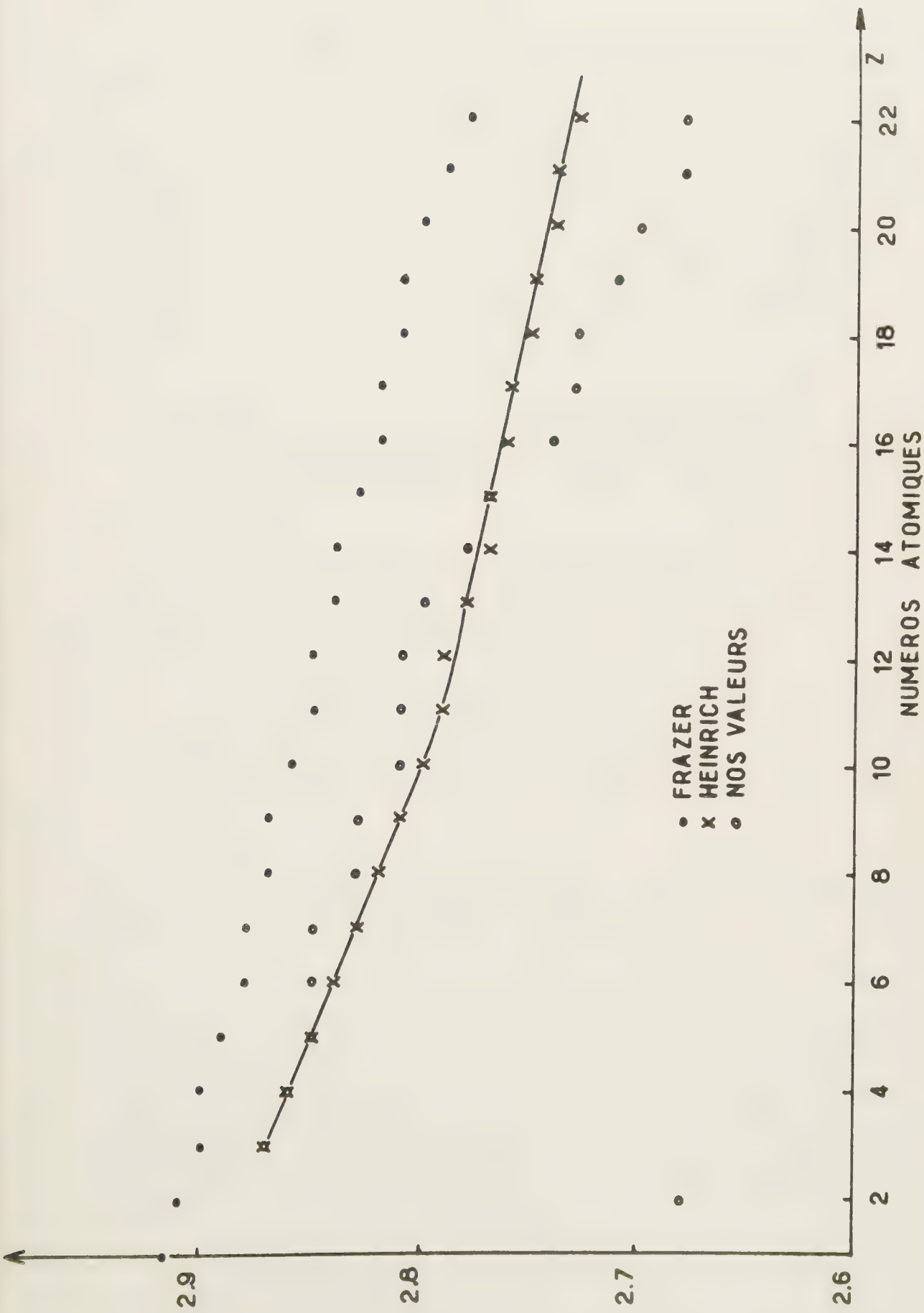


FIGURE : 14



Pour faciliter la discussion, appelons  $\Delta n$  et  $\Delta c$  la différence entre nos valeurs de  $n_K$  et de  $c_K$  et celles trouvées par HEINRICH.

Pour les éléments tels que  $Z = 3, 4, 5, 15$ ,  $\Delta n$  et  $\Delta c$  sont nuls. Pour  $Z$  compris entre  $Z = 6$  et  $Z = 15$ ,  $\Delta n$  est positif mais  $\Delta c$  est négatif et inversement lorsque  $Z > 15$ . Ceci explique la concordance des résultats dans la région (I). Par contre, il n'en est plus de même dans la région (II), le changement intervenant au voisinage de  $Z = 15$ . Nos résultats diffèrent de ceux de HEINRICH mais sont en bon accord avec les valeurs expérimentales de HUGUES [22].

Le tableau ci-joint permet de comparer nos résultats avec ceux des différents auteurs dans la région (II). Dans celui-ci la valeur de  $n_0 = 2,68$  est confirmée par la théorie qui donne  $\frac{8}{3} \approx 2,67$  au voisinage de la discontinuité K.

Notre fonction s'applique d'une façon correcte dans la gamme des courtes longueurs d'onde et en particulier dans celle étudiée par HEINRICH et FRAZER ( $\lambda < 18 \text{ \AA}$ ).

Notons que la formule de HEINRICH et FRAZER peut s'interpréter : ces auteurs se limitent au domaine des rayons X durs ; leur étude se situe donc dans l'une des deux régions où l'exposant reste constant.

Nous sommes maintenant en mesure d'interpréter l'exposant  $n^1(\Lambda_1, Z)$  en fonction des deux variables  $\Lambda_1$  et  $Z$ .

## 2.2.- Exposant $n^1(\Lambda_1, Z)$ .

La courbe expérimentale de  $\text{Log}(\frac{\mu}{\rho})$  en fonction de  $\text{Log } \lambda$  n'étant pas une droite, il n'est pas légitime de considérer l'exposant comme une constante. Cette grandeur dépend en effet de  $Z$  et de l'énergie  $\hbar \omega$  des photons incidents :  $n^1 = n^1(\Lambda_1, Z)$ . La figure (15) représente une famille de courbes  $n^1 = n^1(\Lambda_1)$  à  $Z$  constant.

Examinons la variation de  $n^1$  avec  $Z$  : chacune de ces courbes possède un minimum qui lorsque  $Z$  augmente se déplace vers la région I et s'aplatit jusqu'à devenir parallèle à l'axe des abscisses.



TABLEAU DONNANT C et  $n_0$  de  $(\frac{\mu}{\rho}) = C \lambda^{n_0}$  OBTENUS PAR  
DIFFERENTS AUTEURS, POUR LE TITANE :  
 $Z = 22$  ;  $\lambda_K = 2,495 \text{ \AA}$

| Auteurs          | C      | $n_0$ |
|------------------|--------|-------|
| LEROUX           | 63,387 | 2,83  |
| HEINRICH         | 69,800 | 2,73  |
| FRAZER           | 60,811 | 2,79  |
| Nos va-<br>leurs | 64,433 | 2,68  |

TABLEAU PERMETTANT DE COMPARER DES COEFFICIENTS  
D'ABSORPTION MASSIQUES ( $\text{cm}^2 \text{ g}^{-1}$ ) DU TITANE

| $\lambda (\text{\AA})$ | LEROUX | HEINRICH | FRAZER | Nos ré-<br>sultats | Mesures de<br>HUGUES |
|------------------------|--------|----------|--------|--------------------|----------------------|
| 1,144                  | 92,7   | 89,7     | 88,6   | 92,4               | 91,3                 |
| 1,175                  | 100,0  | 96,7     | 95,5   | 99,2               | 99,1                 |
| 1,313                  | 136,9  | 130,6    | 130,1  | 133,6              | 133,7                |
| 1,542                  | 215,9  | 203      | 203,8  | 205,6              | 206                  |
| 1,658                  | 265,1  | 247      | 249,5  | 249,8              | 251                  |
| 1,936                  | 411,0  | 377      | 384,5  | 378,4              | 377                  |
| 2,102                  | 518,8  | 473      | 483,7  | 471,8              | 470                  |
| 2,290                  | 661,2  | 597      | 614,3  | 593,5              | 593                  |



La région I diminue alors au profit de la région II. Ceci s'explique également par la disparition progressive des termes  $n_q$  avec l'accroissement de  $Z$ . Il en résulte que le domaine d'étude se trouve dans la région II pour les absorbants de  $Z > 17$ .

Essayons d'interpréter la variation de  $n^1 (\Lambda_1)$  à  $Z$  constant dans les deux régions limites suivantes :

- La région I, où la valeur de  $\Lambda_1$  est très différente de 1. Les éléments très légers sont plus favorables à l'application de la théorie puisque l'énergie du faisceau incident est largement supérieure à celle des discontinuités d'absorption de ces éléments. La condition de BORN est justifiée et la valeur  $n^1$  que nous attendons est  $7/2$ . Or,  $n^1$  se rapproche de  $n_0$  et ne dépasse jamais 3. Il existe donc une incohérence avec la théorie dans cette région où l'onde est considérée comme plane. Cependant, nos valeurs sont très proches de celles de HEINRICH et FRAZER. Elle tendent vers une valeur voisine de 2,67 lorsque  $Z$  augmente. Dans le cas du titane, nous trouvons  $n_0 = 2,68$ .

- La région II, où la valeur de  $\Lambda_1$  est voisine de 1. Les valeurs de  $n^1$  sont comprises entre 2,48 et 2,74 et sont proches de la théorie (2,67). L'accord peut être considéré comme excellent, compte tenu de la simplicité de la fonction d'onde utilisée et des multiples d'approximations effectuées dans cette région. Par ailleurs,  $n^1$  tend vers  $n_0$  lorsque  $Z$  augmente et nous retrouvons le cas précédent.

La description phénoménologique devient impossible dans la région intermédiaire puisque la variation de  $n^1$  dépend de la fonction choisie. Ainsi, elle ne peut être prévue que dans la mesure où le calcul théorique s'effectue de façon rigoureuse.

En conclusion, nos calculs sont cohérents au voisinage de la discontinuité d'absorption. Nous n'attendons pas un bon accord avec la théorie dans cette région mais seulement dans la région I.



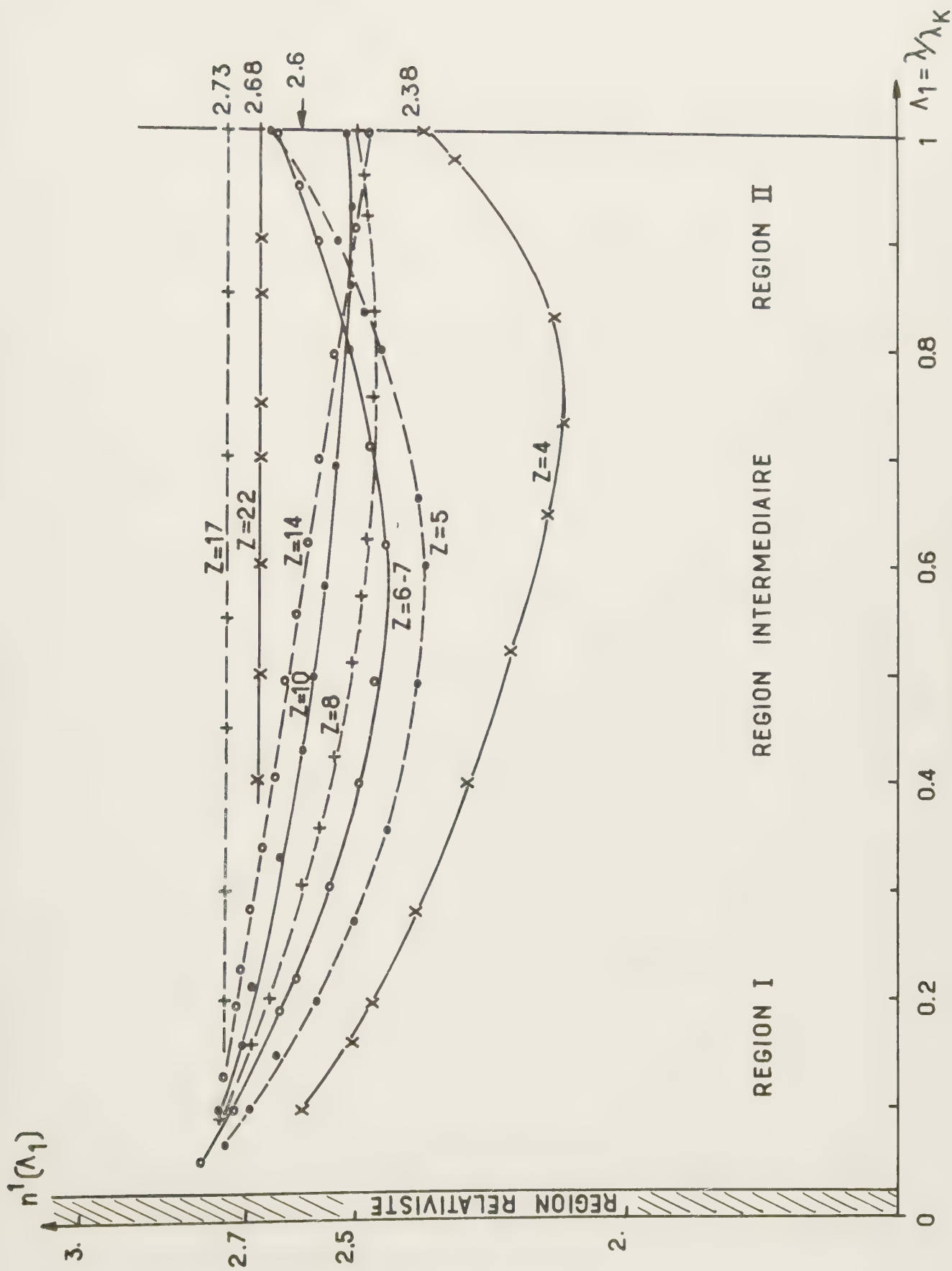


FIGURE 15



Compte tenu de ce qui précède, notre fonction s'applique aussi bien dans le domaine des rayons X durs que dans celui des rayons X très mous.

### 2.3.- Exposant $n^i$ ( $\Lambda_i$ , $Z$ ) ; $i \neq 1$ .

Les coefficients d'absorption dans les autres intervalles de discontinuités peuvent être évalués d'une façon semblable. Les résultats sont reportés dans les tableaux 5, 6, 7. Les valeurs  $n_0^i$  calculées sont plus faibles que celles de HEINRICH et FRAZER; elles augmentent avec le numéro atomique, contrairement à leurs résultats.

Dans l'intervalle  $\lambda_{M_V} < \lambda < \lambda_{N_I}$ , les composantes  $n_q^{10}$  sont très dispersées pour les éléments lourds. Elles rendent compte de l'apparition de maximum sur la courbe expérimentale des coefficients d'absorption au voisinage du seuil d'ionisation.

Nous n'expliquons pas phénoménologiquement les résultats expérimentaux, cependant ce mode de calcul a l'avantage de proposer des valeurs quantitatives conformes aux expériences.

Dans les intervalles définis par la structure fine, les coefficients d'absorption n'ont pas été étudiés en raison du faible nombre de mesures existantes. Plusieurs auteurs [19] [20] les ont calculés en extrapolant les valeurs expérimentales. FRAZER [20], en particulier, a proposé la fonction suivante :

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_m = \left(\frac{\mu}{\rho}\right)^b \quad (5)$$

où  $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)$  représente le coefficient d'absorption une pour la longueur d'onde considérée,  $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)$  est la valeur mesurée du coefficient d'absorption à cette longueur d'onde et  $b$  une constante. Ces procédés de calcul ne peuvent pas être appliqués puisque la courbe expérimentale ne croit pas toujours régulièrement : des anomalies de la variation des coefficients d'absorption ont été décelées dans le domaine des rayons X peu énergétiques [33] à [36] .



| $\lambda (\text{\AA})$ | 4.34   | 9.89   | 13.35   | 18.32   | 23.57   | 31.68   | 44.60   | 67.90   | 84.20    | 113.80*   |
|------------------------|--------|--------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|----------|-----------|
| * 1 H *                | 10.5   | 14.8   | 27.9    | 57.3    | 106.5   | 233.7   | 632.1   | 2448.0  | 5157.1   | 15273.6*  |
| * 2 HE *               | 16.8   | 28.6   | 73.7    | 200.5   | 445.0   | 1130.2  | 3275.6  | 11577.1 | 21428.5  | 48530.8*  |
| * 3 LI *               | 64.1   | 108.9  | 277.2   | 739.2   | 1597.4  | 3860.6  | 10260.5 | 31621.2 | 54610.3  | 113382.8* |
| * 4 RE *               | 177.1  | 298.9  | 744.4   | 1905.5  | 3929.0  | 8874.5  | 21736.3 | 61114.0 | 98982.4  | .0*       |
| * 5 B *                | 378.2  | 629.7  | 1527.2  | 3781.8  | 7540.0  | 16146.6 | 36478.6 | .0      | .0       | .0*       |
| * 6 C *                | 718.9  | 1179.0 | 2760.2  | 6509.9  | 12434.2 | 25640.4 | 2350.8  | 6365.5  | 10599.6  | 21644.9*  |
| * 7 N *                | 1120.8 | 1811.1 | 4097.6  | 9255.0  | 17180.8 | 1714.6  | 3941.6  | 10785.1 | 17859.1  | 35524.0*  |
| * 8 O *                | 1599.3 | 2547.5 | 5623.7  | 12480.1 | 1390.7  | 2740.5  | 6073.3  | 16327.0 | 27074.9  | 54270.8*  |
| * 9 F *                | 2045.5 | 3212.9 | 6933.3  | 865.7   | 1689.7  | 3647.7  | 8611.5  | 23053.1 | 36620.6  | 66303.7*  |
| * 10 NE *              | 2749.2 | 4287.8 | 9196.9  | 1173.5  | 2137.6  | 4333.6  | 9853.8  | 27460.6 | 46941.9  | 99043.2*  |
| * 11 NA *              | 3357.4 | 5208.1 | 776.3   | 1839.2  | 3629.5  | 7890.8  | 18398.1 | 46276.6 | 69648.6  | 113567.3* |
| * 12 MG *              | 4273.5 | 498.4  | 1129.1  | 2663.8  | 5208.0  | 11099.9 | 24913.3 | 58288.7 | 83694.1  | 126079.4* |
| * 13 AL *              | 407.0  | 646.0  | 1457.7  | 3413.3  | 6611.6  | 13859.4 | 30111.3 | 65411.5 | 89186.2  | .0*       |
| * 14 SI *              | 545.5  | 868.2  | 1960.5  | 4558.6  | 8713.5  | 17785.8 | 36868.2 | 74592.1 | .0       | .0*       |
| * 15 P *               | 676.9  | 1077.1 | 2420.8  | 5558.7  | 10446.4 | 20710.8 | 41012.7 | .0      | .0       | .0*       |
| * 16 S *               | 869.1  | 1381.7 | 3101.9  | 7118.1  | 13356.3 | 26250.0 | 49867.2 | .0      | .0       | .0*       |
| * 17 CL *              | 1032.3 | 1627.8 | 3591.2  | 8045.7  | 14730.1 | 27880.0 | 49746.3 | .0      | .0       | .0*       |
| * 18 A *               | 1182.9 | 1860.7 | 4074.9  | 9012.7  | 16254.0 | 30020.4 | .0      | .0      | .0       | .0*       |
| * 19 K *               | 1493.2 | 2312.0 | 4936.7  | 10711.9 | 19232.6 | 36095.7 | .0      | .0      | .0       | .0*       |
| * 20 CA *              | 1771.6 | 2737.7 | 5807.4  | 12435.1 | 21941.6 | .0      | .0      | .0      | .0       | .0*       |
| * 21 SC *              | 1919.5 | 2944.7 | 6278.0  | 13405.7 | 23591.9 | .0      | .0      | .0      | .0       | .0*       |
| * 22 TI *              | 2136.7 | 3289.7 | 6919.5  | 14644.4 | .0      | .0      | .0      | .0      | .0       | .0*       |
| * 23 V *               | 2411.1 | 3678.2 | 7614.5  | 15861.0 | .0      | .0      | .0      | .0      | .0       | .0*       |
| * 24 CR *              | 2811.0 | 4239.1 | 8734.9  | .0      | .0      | .0      | .0      | .0      | .0       | .0*       |
| * 25 MN *              | 3027.6 | 4565.7 | 9408.0  | .0      | 3457.6  | 6089.9  | 11431.0 | 22552.3 | 29740.4  | 41815.2*  |
| * 26 FE *              | 3475.3 | 5231.9 | 10748.4 | 2355.9  | 3949.3  | 7102.3  | 13359.1 | 25964.9 | 34378.4  | 48353.1*  |
| * 27 CO *              | 3502.4 | 5281.8 | 10883.6 | 2577.6  | 4375.0  | 7900.0  | 14747.0 | 28394.3 | 37653.0  | 50847.5*  |
| * 28 NI *              | .0     | .0     | .0      | 3261.2  | 5861.1  | 11907.8 | 28301.0 | 82787.4 | 115805.8 | .0*       |
| * 29 CU *              | .0     | .0     | 1636.4  | 3295.0  | 5655.6  | 10304.2 | 19220.2 | 36145.3 | 47746.4  | .0*       |
| * 30 ZN *              | .0     | .0     | 1844.8  | 3757.9  | 6488.3  | 11838.0 | 21899.6 | 40112.1 | 52054.7  | .0*       |
| * 31 GA *              | .0     | .0     | 2007.9  | 4108.0  | 7087.2  | 12845.2 | 23412.4 | 42125.3 | .0       | .0*       |
| * 32 GE *              | .0     | .0     | 2224.6  | 4554.9  | 7837.5  | 14106.3 | 25404.3 | 45303.4 | .0       | .0*       |
| * 33 AS *              | .0     | 1267.2 | 2509.4  | 5089.1  | 8749.0  | 15821.7 | 28381.8 | .0      | .0       | .0*       |

COEFFICIENTS D'ABSORPTION ( $\text{cm}^2/\text{g}$ )



| $\lambda(\text{\AA})$ | 4.34   | 9.89   | 13.35   | 18.32   | 23.57   | 31.68   | 44.60   | 67.90  | 84.20  | 113.80 |
|-----------------------|--------|--------|---------|---------|---------|---------|---------|--------|--------|--------|
| * 345E *              | .0     | 1377.2 | 2751.9  | 5605.9  | 9619.0  | 17195.7 | 29876.3 | .0     | .0     | .0*    |
| * 35AR *              | 1038.9 | 1547.5 | 3094.8  | 6287.2  | 10726.8 | 18952.4 | 32198.8 | .0     | .0     | .0*    |
| * 36KR *              | 1105.6 | 1657.3 | 3342.9  | 6813.3  | 11576.1 | 20114.5 | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 37RB *              | 1260.8 | 1884.0 | 3773.6  | 7617.7  | 12821.9 | 21990.5 | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 34SR *              | 1434.6 | 2131.4 | 4219.4  | 8388.4  | 13909.8 | 23347.3 | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 39 Y *              | 1544.9 | 2302.5 | 4577.0  | 9118.3  | 15114.0 | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 407R *              | 1692.0 | 2518.1 | 4984.3  | 9851.1  | 16168.7 | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 41NR *              | 1863.8 | 2779.5 | 5512.4  | 10884.6 | 17797.9 | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 42MO *              | 1396.7 | 2078.2 | 4261.7  | 9478.1  | 18813.2 | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 43TC *              | 1983.7 | 2947.5 | 5799.7  | 11334.2 | .0      | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 44RU *              | 2322.9 | 3447.4 | 6750.9  | 13054.6 | .0      | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 45RH *              | 2491.3 | 3700.7 | 7252.0  | 14011.6 | .0      | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 46PD *              | 2680.1 | 3994.8 | 7817.7  | 14853.0 | .0      | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 47AG *              | 3118.8 | 4825.1 | 10400.0 | .0      | .0      | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 48CD *              | .0     | .0     | .0      | .0      | .0      | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 49IM *              | .0     | .0     | .0      | 1019.1  | 947.9   | 769.9   | 518.5   | 404.7  | 806.0  | .0*    |
| * 50SN *              | .0     | .0     | .0      | 2250.3  | 3270.1  | 4774.7  | 6429.6  | 6780.5 | 6026.0 | .0*    |
| * 51SR *              | .0     | .0     | 1255.3  | 2249.6  | 3399.6  | 5009.0  | 6586.1  | 6868.4 | .0     | .0*    |
| * 52TE *              | .0     | .0     | 1463.9  | 2451.1  | 3562.2  | 5141.7  | 6744.3  | 6763.4 | .0     | .0*    |
| * 53 I *              | .0     | .0     | 1554.3  | 2659.5  | 3903.3  | 5610.2  | 7122.0  | .0     | .0     | .0*    |
| * 54XE *              | .0     | .0     | 1732.0  | 2868.8  | 4136.4  | 5907.8  | 7536.6  | .0     | .0     | .0*    |
| * 55CS *              | .0     | .0     | 1763.2  | 3025.8  | 4408.5  | 6223.2  | 7633.2  | .0     | .0     | .0*    |
| * 56BA *              | .0     | 1024.9 | 1762.7  | 2984.7  | 4302.5  | 6054.5  | 7742.1  | .0     | .0     | .0*    |
| * 57LA *              | .0     | 1707.5 | 2375.0  | 3364.0  | 4438.5  | 6144.7  | 8951.7  | .0     | .0     | .0*    |
| * 5ACE *              | .0     | 1227.0 | 2279.5  | 4254.0  | 6653.3  | 9845.2  | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 59PR *              | 938.5  | 1308.8 | 2319.5  | 4092.4  | 6107.9  | 8699.9  | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 60ND *              | 976.3  | 1334.7 | 2297.4  | 3907.0  | 5674.0  | 8015.9  | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 61PM *              | 1028.5 | 1436.8 | 2514.7  | 4280.5  | 6168.1  | 8805.5  | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 62SM *              | 1032.7 | 1432.1 | 2500.0  | 4302.8  | 6286.5  | 9125.5  | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 63FU *              | 1043.9 | 1478.8 | 2627.1  | 4513.1  | 6593.5  | 9593.6  | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 64GD *              | 1137.9 | 1561.8 | 2683.2  | 4572.1  | 6669.6  | 9542.7  | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 65TB *              | 1239.2 | 1681.8 | 2887.0  | 5029.2  | 7450.2  | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 66DS *              | 1201.0 | 1700.9 | 3042.3  | 5310.9  | 7866.5  | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 67MO *              | 1246.2 | 1779.4 | 3202.0  | 5599.4  | 8328.6  | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 68FR *              | 1480.7 | 1992.0 | 3357.2  | 5822.8  | 9027.1  | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 69TM *              | 1403.4 | 2000.2 | 3622.4  | 6399.9  | 9535.6  | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 70VB *              | 1253.9 | 1836.5 | 3607.6  | 7412.3  | 13273.9 | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 71LU *              | 1532.7 | 2176.5 | 3936.0  | 6937.0  | 10247.7 | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |
| * 72HF *              | 1708.6 | 2334.0 | 4041.4  | 7212.0  | .0      | .0      | .0      | .0     | .0     | .0*    |



## CONCLUSION

Nous avons essayé, dans ce travail, de préciser les lois qui déterminent les coefficients d'absorption des rayons X peu énergétiques. Notre étude s'est faite en deux parties.

Dans la première, nous avons étudié les spectres d'absorption X des atomes.

A l'aide du modèle de l'atome hydrogénoïde, nous avons calculé les niveaux d'énergie et les coefficients partiels d'écran. La distribution des électrons dans chacun des atomes se trouve ainsi visualisée. Les niveaux énergétiques calculés concordent bien avec les valeurs expérimentales en ce qui concerne les électrons internes. Cependant, la méthode n'a pu être étendue avec le même succès aux électrons périphériques en raison de l'ignorance de leurs états réels dans un composé.

La connaissance des coefficients partiels d'écran de chaque électron offre des applications intéressantes, elle permet :

- la détermination des niveaux d'énergie et des longueurs d'onde d'émission.
- la mise en évidence de l'influence sur ces grandeurs de la liaison chimique, particulièrement importante pour les éléments légers. Le déplacement des raies des éléments constitutifs du composé peut alors s'évaluer empiriquement à l'aide de la variation de ces coefficients.
- l'évaluation de l'énergie moyenne d'ionisation qui intervient dans l'expression théorique du pouvoir de ralentissement.

Dans la deuxième partie, nous avons étudié les coefficients d'absorption. Les théories rigoureuses ont dû être abandonnées ; elles



ne conduisaient pas à des formules utilisables.

La formule semi empirique employée du type  $(\frac{\mu}{\rho}) = c \Lambda_i^n$  dérive de la théorie élémentaire de la photo-absorption. Nous avons donné une expression de  $n$  qui varie en fonction de la longueur d'onde incidente et de l'atome absorbant ( $Z, \lambda_i$ ). Cette généralisation nous a permis :

- de retrouver la relation analytique de LEROUX  $(\frac{\mu}{\rho}) = c \lambda^{n_0}$
- de calculer le coefficient d'absorption pour tout rayonnement X.

Nous avons analysé la variation de l'exposant avec  $\Lambda_i$  et  $Z$ . Un comportement "curieux" des éléments très légers est observé dans la région intermédiaire. Notre formule ne permet pas de l'expliquer. Cependant l'écart entre l'exposant et  $n_0$  ( $\Lambda_1 \ll 1$ ) caractérise probablement la présence d'électrons AUGER dans cette région. Sa variation serait alors due au concours des effets AUGER et photoélectrique. Mais, en l'absence de théorie rigoureuse, il n'est pas possible de définir leurs contributions respectives. De ce fait, l'étude séparée des effets AUGER et photoélectrique serait indispensable pour compléter ce travail dans le domaine des rayons X de faible énergie.



## BIBLIOGRAPHIE

- [1] SOKOLOV, LOSKUTOV, TERNOV, Quantum Mechanics  
Ed. Holt, Rinehart and Winston, INC, 1966.
- [2] COMPTON AND S.K. ALLISON, X-rays in theory and experiment  
Ed. Van Norstrand company, INC, 1957
- [3] SOMMERFELD; Atombau und spektrallinien  
Ed. Braunschweig, F. Vieweg, 1929
- [4] CAUCHOIS, Atomes, spectres, matière  
Ed. Albin Michel, 1950
- [5] J.A. BEARDEN, Phys. Rev. 137, 455 (1965).  
Rev. of. Mod. Phys. 39, 125,(1967).
- [6] WHITE, introduction to atomic spectra.  
Ed. Mc Coraw - Hill book company, INC, 1934
- [7] J. BARRIOL, éléments de mécanique quantique  
Ed. Masson et Cie, 1966
- [8] EVANS, the atomic nucleus  
Ed. Mc Graw-Hill book company, 1955
- [9] HARVEY HALL, Rev. Of Mod. Phys. 8, 358 (1936)
- [10] J.D. STEPHESON, Premier congrès européen de cristallographie  
BORDEAUX 5-8 septembre 1973.
- [11] J.A. BEARDEN, J. Appl. Phys. 37(4) : 1681, (1966)
- [12] M. GERL, interactions particules-matière (généralités)  
Ecole d'Eté de VILLARD de LANS, 1972.
- [13] W. HEITLER, the quantum theory of radiation  
Oxford University Press, 1949
- [14] C.A. COULSON and W.E. DUNCANSON,  
Proc. Roy. Soc. 62, 37 (1944)



- [15] S.T. MANSON and J. COOPER  
Phys. Rev. 165, 126 (1968).
- [16] M.C. GUIRE.  
Phys. Rev. 175, 20 (1968)
- [17] B.L. HENKE, R.W. WHITE and LUNDBERG  
J. Appl. Phys. 28, 98 (1957)
- [18] J. LEROUX  
Advances in X Ray Analysis 5, 153 (1961)
- [19] K.F.J. HEINRICH, the électron microprobe, p. 296-378  
Ed. T.D. Mc Kinley, K.F.J. Heinrich and D.B. WITTRY, 1964.
- [20] J.Z.F. FRAZER  
S.I.O. Réf. N° 67-29, Univ. of California, La Jolla 1967
- [21] J.A. VICTOREEN  
J. Appl. Phys. 14, 95, 1943 ; 19, 855, 1948 ; 20, 1141, 1949
- [22] G.D. HUGUES, J.B. WOODHOUSE and I.A. BUCKLOW  
Brit. J. Appl. Phys, 695, 1968
- [23] H.H. BIERMANN  
Ann. Physik 26, 740 (1936)
- [24] B.A. COOKE and E.A. STEWARDSON  
Brit. J. Appl. Phys. 15, 1315 (1964)
- [25] P. JAEGLE, F. COMBET FARNOUX, P. DHEZ  
Phys. Letters 26A, 364 (1968)
- [26] LUKIRSKY et al.  
Nauk USSR, optics ans spectrocopy 20 ; 203 (1964)
- [27] F. WUILLEUMIER  
J. Phys. Radium 26, 776 (1965)
- [28] D.H. TOMBOULAIN  
Phys. Rev. 1196 (1951) ; 1585 (1954) ; 1471 (1961) ; 677 (1962) ;  
1525 (1964)
- [29] D.I. HOPKINS  
J. Appl. Phys. 30;2, 185 (1959)



- [30] W.R. HUNTER and R. TOUBEY  
J. Phys. 25, 148 (1964)
- [31] SPENCER  
Phys. Rev. 38, 1932 (1931)
- [32] J.A.R. SAMSON et al.  
J. Opt. Soc. 842 (1964) ; 1035 (1965)
- [33] D.L. EDERER  
Phys. Rev. Letters 13, 760 (1964)
- [34] J.W. COOPER  
Phys. Rev. Letters 13, 762 (1964)
- [35] A.P. KUKIRSKY and T.M. ZIMKINA  
Bull. Acad. Sci. USSR, Phys. Ser. 27, 808 (1963)
- [36] T.M. ZIMKINA et S.A. GRIBOVSKY  
J. de Phys. 32, C4-282 (1971).
- [37] Françoise COMBET et Yvonne HENOD  
C.R. Acad. Sc. Paris série B, 138 (1967).



NOM DE L'ETUDIANT : TRAN HUU LOI

NATURE DE LA THESE : DOCTEUR INGENIEUR

VU, APPROUVE

& PERMIS D'IMPRIMER

NANCY, le 22 JUIN 1975

LE PRESIDENT DE L'UNIVERSITE DE NANCY I

